

PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 2004-067658

(43)Date of publication of application : 04.03.2004

(51)Int.Cl.

C07F 15/00
C07C 49/92
C07D277/66
C07D417/04
C07D417/10
C09K 11/06
H05B 33/14
H05B 33/22

(21)Application number : 2002-304883

(71)Applicant : MITSUBISHI CHEMICALS CORP

(22)Date of filing : 18.10.2002

(72)Inventor : AKIYAMA SEIJI

SATO HIDEKI

SATO YOSHIHARU

(30)Priority

Priority number : 2002168804

Priority date : 10.06.2002

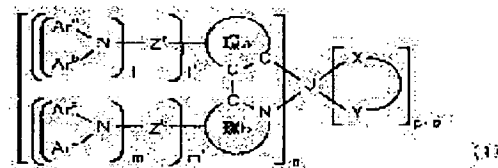
Priority country : JP

(54) ORGANOMETALLIC COMPLEX AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICE BY USING THE SAME

(57)Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a new organometallic complex capable of improving the color purity especially in long wave light-emission, the efficiency of the light-emission and the long life of its element, and an organic electroluminescent device having a long life and a high light-emitting efficiency by using the organometallic complex.

SOLUTION: This organometallic complex is expressed by general formula (1). The organic electroluminescent device obtained by laminating a cathode, a light-emitting layer and an anode in this order on a substrate board contains the organometallic complex in the light-emitting layer.



LEGAL STATUS

[Date of request for examination]

23.08.2005

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

THIS PAGE BLANK (USPTO)

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2004-67658

(P2004-67658A)

(43) 公開日 平成16年3月4日 (2004.3.4)

(51) Int. Cl. 7

C07F 15/00
C07C 49/92
C07D 277/66
C07D 417/04
C07D 417/10

F I

C07F 15/00
C07C 49/92
C07D 277/66
C07D 417/04
C07D 417/10

E

テーマコード (参考)

3K007
4C063
4H006
4H050

審査請求 未請求 請求項の数 5 O L (全 108 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2002-304883 (P2002-304883)
(22) 出願日 平成14年10月18日 (2002.10.18)
(31) 優先権主張番号 特願2002-168804 (P2002-168804)
(32) 優先日 平成14年6月10日 (2002.6.10)
(33) 優先権主張国 日本国 (JP)

(71) 出願人 000005968
三菱化学株式会社
東京都港区芝五丁目3番8号
(74) 代理人 100086911
弁理士 重野 剛
(72) 発明者 秋山 誠治
神奈川県横浜市青葉区鴨志田町1000番
地 三菱化学株式会社内
(72) 発明者 佐藤 秀樹
神奈川県横浜市青葉区鴨志田町1000番
地 三菱化学株式会社内
(72) 発明者 佐藤 佳晴
神奈川県横浜市青葉区鴨志田町1000番
地 三菱化学株式会社内
Fターム (参考) 3K007 AB03 AB04 AB06 AB11 DB03
最終頁に続く

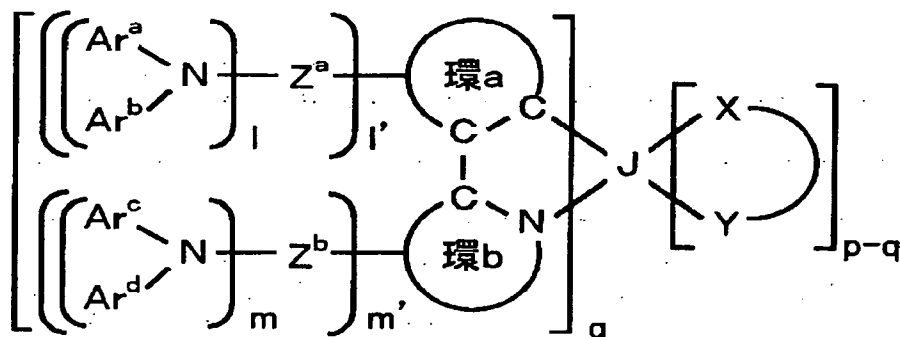
(54) 【発明の名称】 有機金属錯体、およびこれを用いた有機電界発光素子

(57) 【要約】

【課題】 特に長波長発光における色純度の向上、発光の高効率化、および素子の長寿命化が可能な新規有機金属錯体と、この有機金属錯体を使用した長寿命で高発光効率の有機電界発光素子を提供する。

【解決手段】 一般式(1)で表される有機金属錯体。基板上に陽極、発光層、および陰極が順次積層されてなる有機電界発光素子において、発光層がこの有機金属錯体を含有する有機電界発光素子。

【化119】



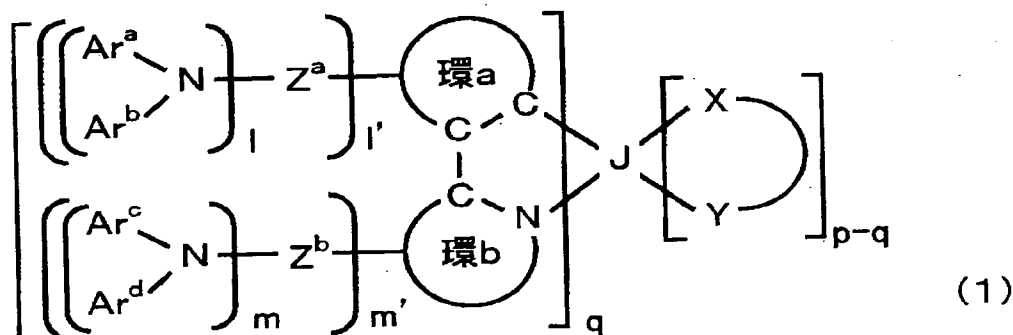
(1)

【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(1)で表される有機金属錯体。

【化1】



10

(式中、JはIr、Os、Pt、Au、Pdのいずれかの元素を示す。

l、mはアリールアミノ基の数を表し、各々独立に1または2である。

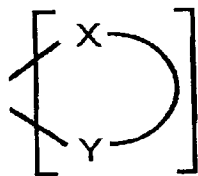
l'、m'は各々独立に0、1または2であり、l' + m' ≥ 1である。

pはJの価数を表し、1、2または3である。

qは配位子の数を表し、1、2または3である。

XおよびYは、各々独立に、下記式

【化2】



20

で表される2座配位子の一部を構成する酸素原子、窒素原子または炭素原子を表し、(X, Y)は(C, N)、(O, O)または(O, N)である。

Z^a、Z^bは各々独立に直接結合、もしくは2価または3価の連結基を表す。

Ar^a及びAr^cは各々独立に、アルキル基、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表し、これらはいずれも置換基を有していてもよい。Ar^bおよびAr^dは各々独立に、置換基を有していてもよい、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表す。また、Ar^aとAr^b、および/またはAr^cとAr^dが結合して縮合環を形成していても良く、該縮合環は置換されていてもよい。

Z^aが2価または3価の連結基を表す場合、Ar^aとZ^a、および/またはAr^bとZ^aが互いに結合して、置換基を有していても良い環を形成していても良く、Z^bが2価または3価の連結基を表す場合、Ar^cとZ^b、および/またはAr^dとZ^bが互いに結合して、置換基を有していても良い環を形成していてもよい。

40

環aは、置換基を有していてもよい、芳香族炭化水素基もしくは芳香族複素環基を表す。

環bは、置換基を有していてもよい芳香族複素環基を表す。

Z^aが直接結合の場合、Ar^aと環a、および/またはAr^bと環aが結合して、置換基を有していても良い環を形成していても良く、Z^bが直接結合の場合、Ar^cと環b、および/またはAr^dと環bが結合して、置換基を有していても良い環を形成していてもよい。

【請求項2】

一般式(1)において、Z^aが直接結合であり、Ar^aまたはAr^bが環aと結合し、全

50

体としてカルbazolリル基を形成する、請求項1記載の有機金属錯体。

【請求項3】

基板上に陽極、発光層、および陰極が順次積層されてなる有機電界発光素子において、該発光層が請求項1または2記載の有機金属錯体を含むことを特徴とする、有機電界発光素子。

【請求項4】

該発光層が、正孔注入・輸送性または電子注入・輸送性を有するホスト化合物を含有し、該ホスト化合物に対して請求項1または2記載の有機金属錯体がドープされている、請求項3に記載の有機電界発光素子。

【請求項5】

該発光層と陰極との間に正孔阻止層を有する、請求項3または4に記載の有機電界発光素子。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は新規な燐光色素として有用な有機金属錯体と、このような有機金属錯体を用いた、薄膜型有機電界発光（EL）デバイスや近赤外発光材料に用いられる有機電界発光素子に関するものである。

【0002】

【従来の技術】

これまで、有機電界発光素子には蛍光性色素が数多く用いられてきたが、フラットパネル・ディスプレイ等の表示、蛍光灯や標識灯等の光源、さらには近赤外発光材料として応用するためには、素子の発光効率をさらに改善する必要があり、新たな発光材料の開発が求められている。

【0003】

近年、素子の発光効率を上げる試みの一つとして、3重項励起状態からの発光、すなわち燐光を利用した燐光色素の利用が注目を集めている。燐光を用いた場合には従来の1重項励起状態からの発光（蛍光）に比べて、約4倍の取り出し効率が可能となり、高効率化が期待されるからである。

【0004】

実際、下記の構造で表される有機イリジウム錯体（2）を4,4'-ジ（N-カルbazolリル）ピフェニル（CBP）にドープさせることにより、発光波長510nmの緑色発光を示し、その外部量子効率は13%と従来の1重項発光素子の量子効率限界値（5%）を大きく上回ることが報告されている（Appl. Phys. Lett., 75巻、4項、1999年）。

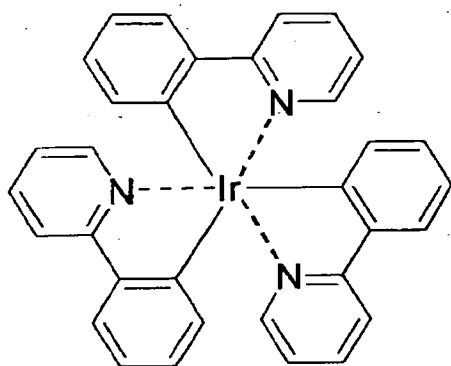
【0005】

【化3】

10

20

30



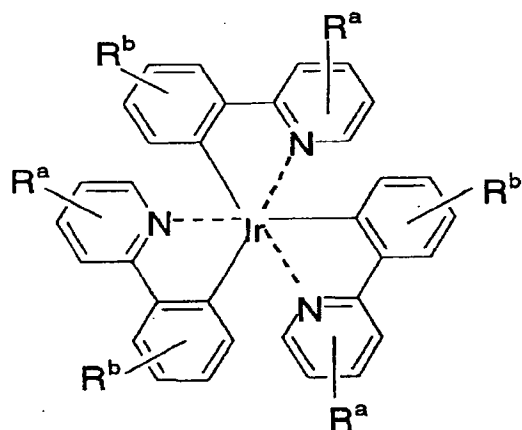
(2)

【0006】

さらに上記有機イリジウム錯体(2)に種々の置換基を導入してなる下記有機イリジウム錯体(3)を使用することにより、錯体間の燐光の自己消光を制御したり(Adv. Mater., 2001, 13, 1245)、発光波長のチューニングが可能であることも報告されている(Chem. Commun., 2001, 1494, Appl. Phys. Lett., 2001, 79, 449)。

【0007】

【化4】



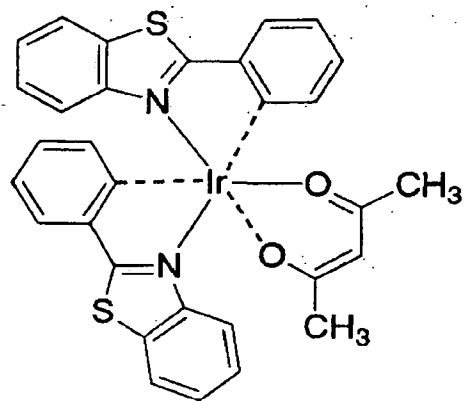
(3)

【0008】

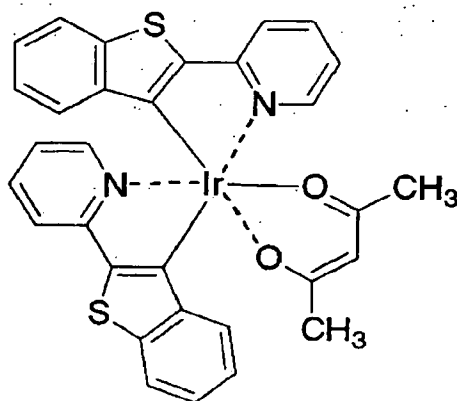
また最近、Thompsonらは2核錯体を経由したイリジウム錯体の簡便な合成法により、種々の有機イリジウム錯体を開発し、青色から赤色までの有機電界発光素子を達成している。たとえば、下記に示す有機イリジウム錯体(4)、(5)を用いた場合には、緑色よりも長波長に発光を有し、かつ従来の一重項発光素子に比べて高効率の電界発光素子になることが明らかにされている(Inorg. Chem., 2001, 40, 1074, J. Am. Chem. Soc., 2001, 123, 4304, WO 01/41512号公報)。

【0009】

【化5】



(4)



(5)

10

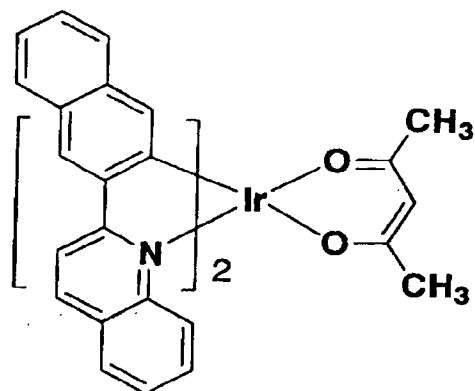
【0010】

また、WO 01/345183号公報には、下記の有機イリジウム錯体(6)が発光波長623nm、外部発光効率10.9%という高輝度の赤色発光材料であることが記載されている。

【0011】

【化6】

20



(6)

30

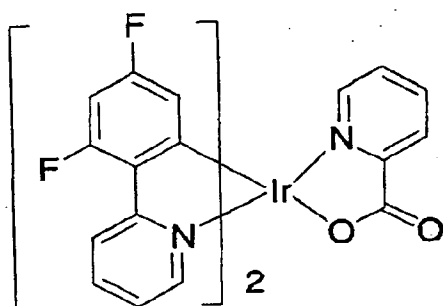
【0012】

さらに、最近ではイリジウム錯体を用いた青色発光材料の開発もさかんに行われており、現状ではフッ素原子を置換基にもつイリジウム錯体が有力視されている(Appl. Phys. Lett., 2001, 79, 2082, WO 02/15645号公報, 特開 2002-117978号公報, WO 02/02714号公報)。

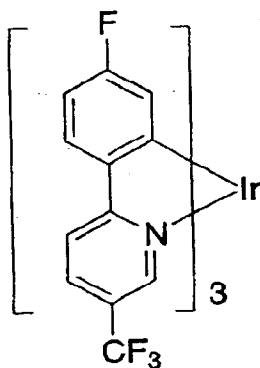
【0013】

【化7】

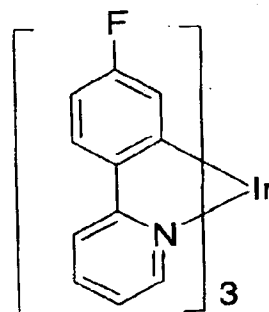
40



(7)



(8)



(9)

10.

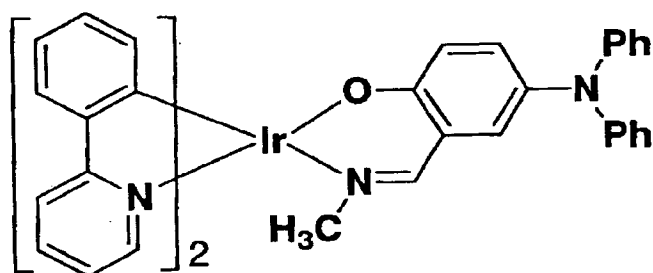
【0014】

なお、配位子にアリールアミノ基を有するイリジウム錯体の例として、Thompsonらにより、下記の有機イリジウム錯体(10)が報告されている(WO 01/41512号公報)。

【0015】

【化8】

20



(10)

30

【0016】

【特許文献1】

WO 02/15645号公報

【特許文献2】

特開 2002-117978号公報

【特許文献3】

WO 02/02714号公報

【特許文献4】

WO 01/41512号公報

【非特許文献1】

Appl. Phys. Lett., 2001, 79, 2082

40

【0017】

【発明が解決しようとする課題】

しかしながら、有機EL材料などへの実用化のためには、さらなる色純度の調整、低駆動電圧化、安定性、耐久性などの多くの問題が残されている。なかでも低駆動電圧化は、省エネルギー、素子の長寿命化にもつながるため、最優先すべき課題である。

【0018】

50

本発明は、上記従来の実状に鑑みてなされたものであって、特に長波長発光における色純度の向上、発光の高効率化、低駆動電圧化、および素子の長寿命化が可能な新規有機金属錯体と、この有機金属錯体を使用した長寿命で高発光効率の有機電界発光素子を提供することを目的とする。

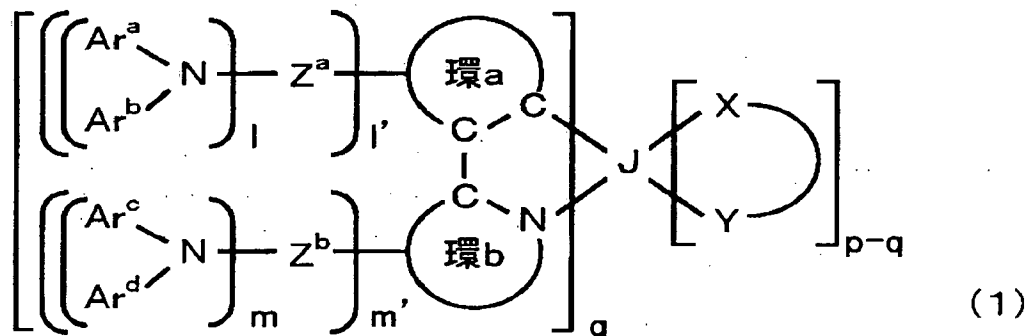
【0019】

【課題を解決するための手段】

本発明の有機金属錯体は、下記一般式(1)で表されることを特徴とする。

【0020】

【化9】



(式中、JはIr、Os、Pt、Au、Pdのいずれかの元素を示す。

l、mはアリールアミノ基の数を表し、各々独立に1または2である。

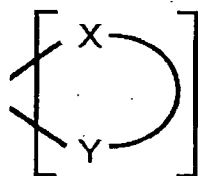
l'、m'は各々独立に0、1または2であり、l' + m' ≥ 1である。

pはJの価数を表し、1、2または3である。

qは配位子の数を表し、1、2または3である。

XおよびYは、各々独立に、下記式

【化10】



で表される2座配位子の一部を構成する酸素原子、窒素原子または炭素原子を表し、(X, Y)は(C, N)、(O, O)または(O, N)である。

Z^a、Z^bは各々独立に直接結合、もしくは2価または3価の連結基を表す。

Ar^a及びAr^cは各々独立に、アルキル基、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表し、これらはいずれも置換基を有していてもよい。Ar^bおよびAr^dは各々独立に、置換基を有していてもよい、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表す。また、Ar^aとAr^b、および/またはAr^cとAr^dが結合して縮合環を形成していても良く、該縮合環は置換されていても良い。

Z^aが2価または3価の連結基を表す場合、Ar^aとZ^a、および/またはAr^bとZ^aが互いに結合して、置換基を有していても良い環を形成していても良く、Z^bが2価または3価の連結基を表す場合、Ar^cとZ^b、および/またはAr^dとZ^bが互いに結合して、置換基を有していても良い環を形成していても良い。

環aは、置換基を有していても良い、芳香族炭化水素基もしくは芳香族複素環基を表す。

環bは、置換基を有していても良い芳香族複素環基を表す。

Z^aが直接結合の場合、Ar^aと環a、および/またはAr^bと環aが結合して、置換基

10

20

30

40

50

を有していても良い環を形成していても良く、 Z^b が直接結合の場合、 Ar^c と環 b 、および／または Ar^d と環 b が結合して、置換基を有していても良い環を形成していても良い。）

【0021】

本発明者らは、鋭意検討を重ね、上記一般式 (1) で表されるアリールアミノ基を有する CN 2 座配位子をもつ有機金属錯体が、優れた性能を有する 3 重項燐光材料であることを知見し、本発明を達成した。

【0022】

前述の如く、従来において、配位子にアリールアミノ基を有する有機イリジウム錯体 (10) は既に知られているが、この有機イリジウム錯体 (10) では、アリールアミノ基が発光配位子と直接結合していないため、結合を介した電荷移動が起こらず、ホッピングによる電荷移動のみが起こるので、アリールアミノ基の存在が電荷移動度にそれほど大きな影響は与えないことが考えられる。

【0023】

そこで、この問題点を克服するために、本発明者らは CN 発光配位子にアリールアミノ基を導入することを試みた結果、上記課題を解決できることを見出し、本発明を完成するに至った。

【0024】

特に、比較的長波長の発光を有する錯体の場合、電荷輸送性材料やホスト材料とのバンドギャップが大きくなるため、さらに電荷移動が起こりにくく、高電圧化や発光効率低下にも繋がることが予想される。

【0025】

本発明は、比較的長波長の発光を有する燐光材料、例えば最大発光波長波長 500 nm 以上の燐光材料に適用した場合、特に効果的である。

【0026】

本発明の有機電界発光素子は、基板上に陽極、発光層、および陰極が順次積層されてなる有機電界発光素子において、該発光層がこのような本発明の有機金属錯体を含有することを特徴とするものであり、長寿命で発光効率が高い。

【0027】

本発明の有機電界発光素子において、発光層は、正孔注入・輸送性または電子注入・輸送性を有するホスト化合物を含有し、このホスト化合物に対して本発明の有機金属錯体がドーピングされていることが好ましい。また、発光層と陰極との間には正孔阻止層を有することが好ましい。

【0028】

【発明の実施の形態】

以下、本発明の実施の形態を詳細に説明する。

まず、本発明の有機金属錯体について説明する。

本発明の有機金属錯体は、前記一般式 (1) で表されるものである。

【0029】

一般式 (1) において、 J は Ir、Os、Pt、Au、Pd のいずれかの元素を示し、好ましくは Pt または Ir、特に好ましくは Ir である。

【0030】

l 、 m はそれぞれアリールアミノ基 $-NAr^aAr^b$ 、 $-NAr^cAr^d$ の数を表し、各々独立に 1 または 2 である。

l' 、 m' は各々独立に 0、1 または 2 であり、 $l' + m' \geq 1$ である。

p は中心元素 J の価数であり、1、2 または 3 である。

q は配位子の数を表し、1、2 または 3 である。

なお、 $p - q$ が配位子の数を表すため、 $p - q \geq 0$ である。

【0031】

一般式 (1) において、

10

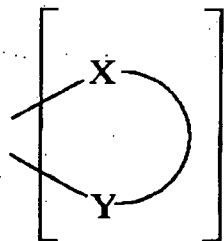
20

30

40

50

【化 1 1】



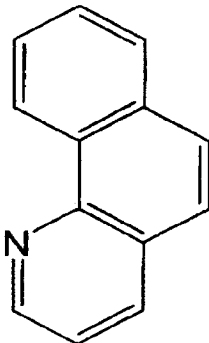
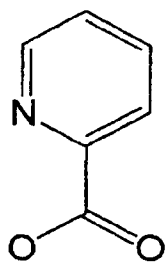
10

は、XおよびYでI r等の元素Jと結合する2座配位子を表す。XおよびYは各々独立に、該2座配位子の一部を構成する酸素原子、窒素原子または炭素原子を表し、(X, Y)は(C, N)、(O, O)または(O, N)である。

【0032】

該2座配位子は、便宜上X-Y間を線で結合し表現しているが、アセチルアセトン等のようにX-Y間が直鎖で結合されている配位子でも良く、また

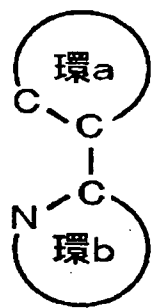
【化 1 2】



20

などのように、途中に環を含んでも良い。また下記構造式で表される配位子

【化 1 3】



30

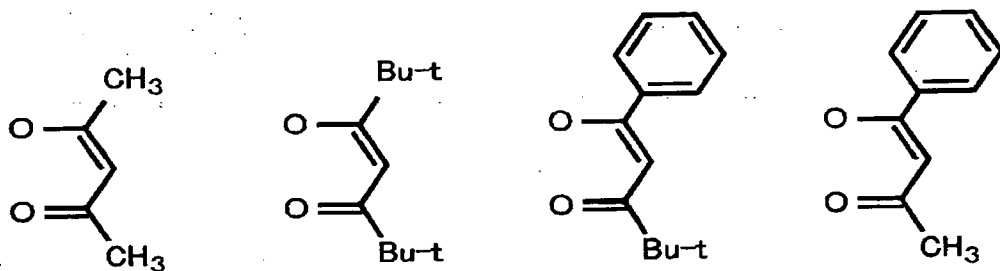
40

(式中、環aおよび環bは前記一般式(1)におけると同義である)であってても良い。

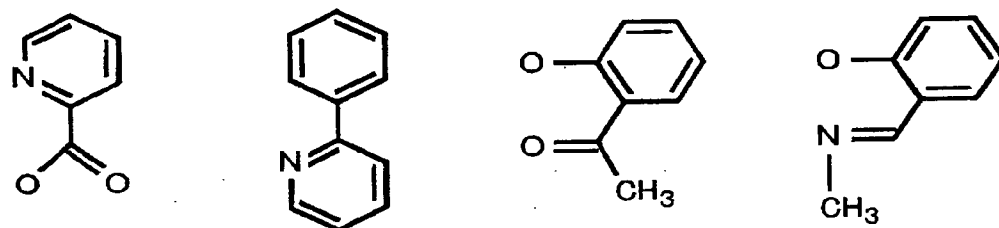
【0033】

X、Yを含む2座配位子として、好ましくは

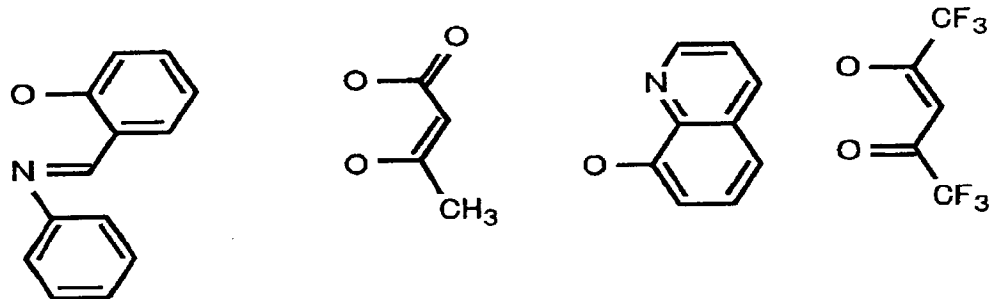
【化 1 4】



10 -



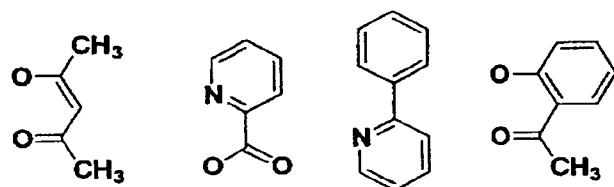
20



特に好ましくは、

【化15】

30



が挙げられるが、これらに限定されるものではない（上記式中、Bu-tはt-ブチル基を示す。）。

【0034】

Z^a および Z^b は、直接結合、もしくは2価または3価の連結基を表す。

40

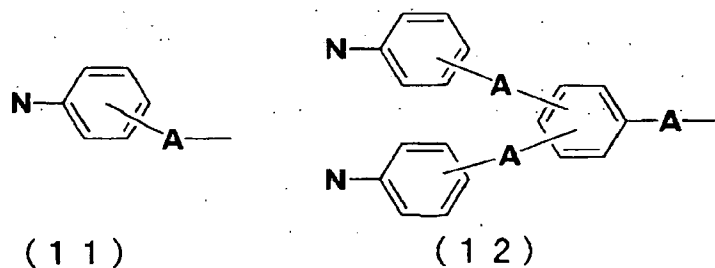
具体的には、

直接結合、

置換基を有していても良い5または6員環の、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基、

もしくは以下の一般式で表される連結基

【化16】

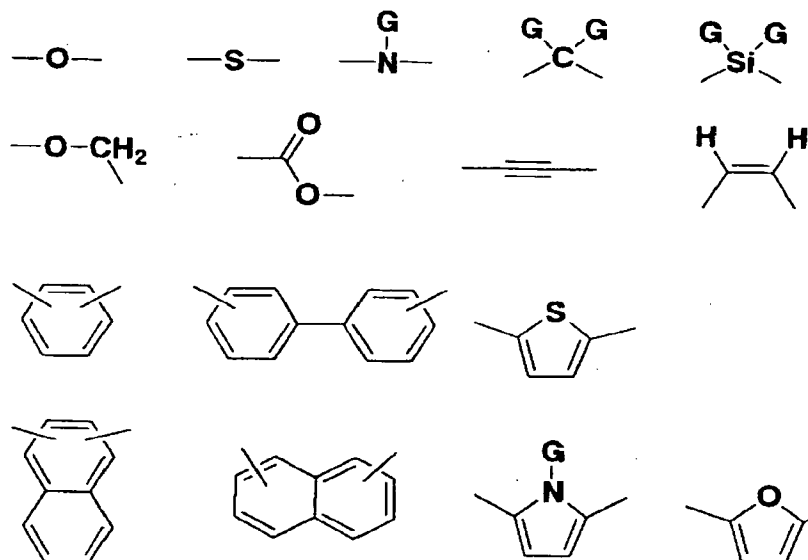


(上記式中、Nはアリールアミノ基—NAr^aAr^bまたは—NAr^cAr^dを表わし、Aは各々独立して2価の連結基を表わす。また、上記式中では記載を省略したが、式中のフェニレン基はいずれも、後述する基で置換されていてもよい。)等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0035】

上記式(11)および(12)における2価の連結基Aとして、例えば以下の基が挙げられるが、これらに限定されるわけではない。

【化17】



(上記式中、Gは各々独立して、水素原子、炭素数1～6のアルキル基またはフェニル基を表す。なお、上記式中の各環は無置換であるが、いずれも後述する置換基を有していても良い。)

【0036】

Z^aおよびZ^bの、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基の例としては、以下の基が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

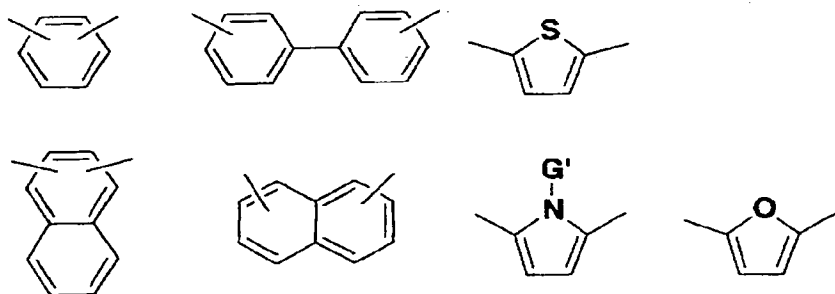
【化18】

10

20

30

40



10 -

(上記式中、G' は水素原子、炭素数 1～6 のアルキル基またはフェニル基を表す。なお、上記式中の各環は無置換であるが、いずれも後述する置換基を有していても良い。)

【0037】

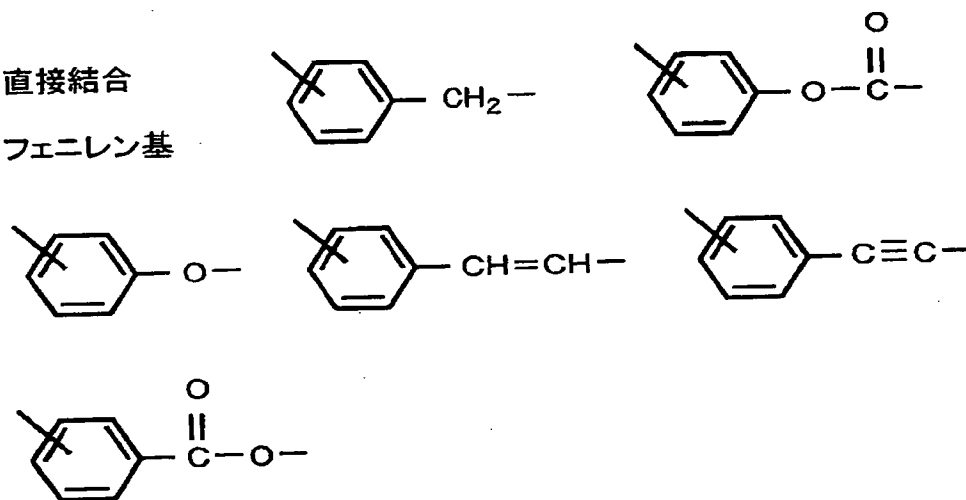
Z^a および Z^b として、より好ましくは

【化19】

20

直接結合

フェニレン基



30

である。

【0038】

なお、Z^a および Z^b が環 a または環 b における窒素原子と結合する場合、Z^a および Z^b は (直接結合であるより) 2 価または 3 価の連結基が好ましい。

【0039】

一般式 (1) における Ar^a および Ar^c は、各々独立にアルキル基、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表し、これらはいずれも置換基を有していても良い。該アルキル基としては、炭素数 1～10 程度の直鎖または分岐のアルキル基が好ましい。また、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基の場合は、5 または 6 員環の、単環または 2～3 縮合環が好ましい。これらのアルキル基、芳香族炭化水素基および芳香族複素環基が有する置換基については後述する。

40

【0040】

一般式 (1) において、Ar^b および Ar^d は各々独立に、置換基を有していても良い、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表すが、好ましくは、5 または 6 員環の、単環または 2～3 縮合環である。

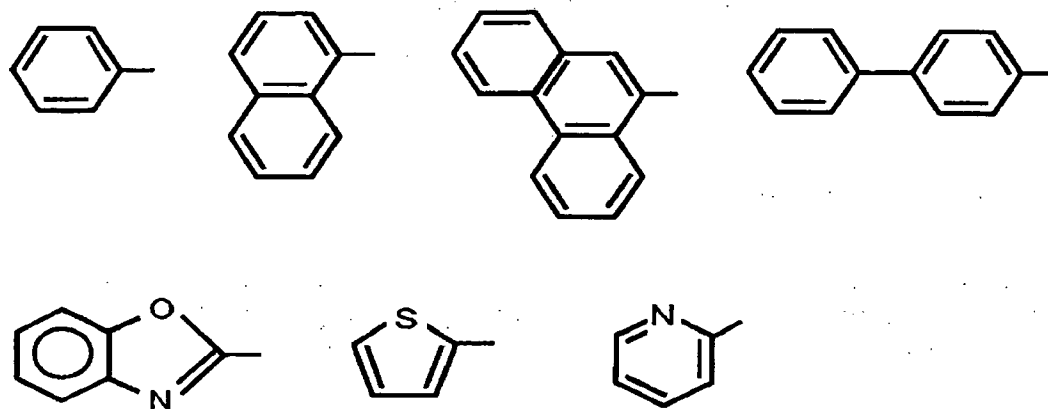
【0041】

50

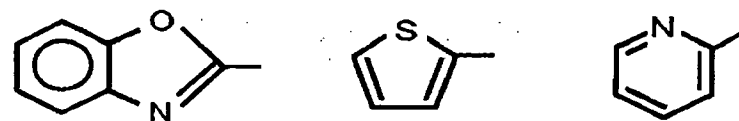
一般式(1)における $Ar^a \sim Ar^d$ について、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基である場合の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。また下記の例示では記載を省略したが、いずれも置換基を有していても良い。該置換基については後述する。

【0042】

【化20】



10

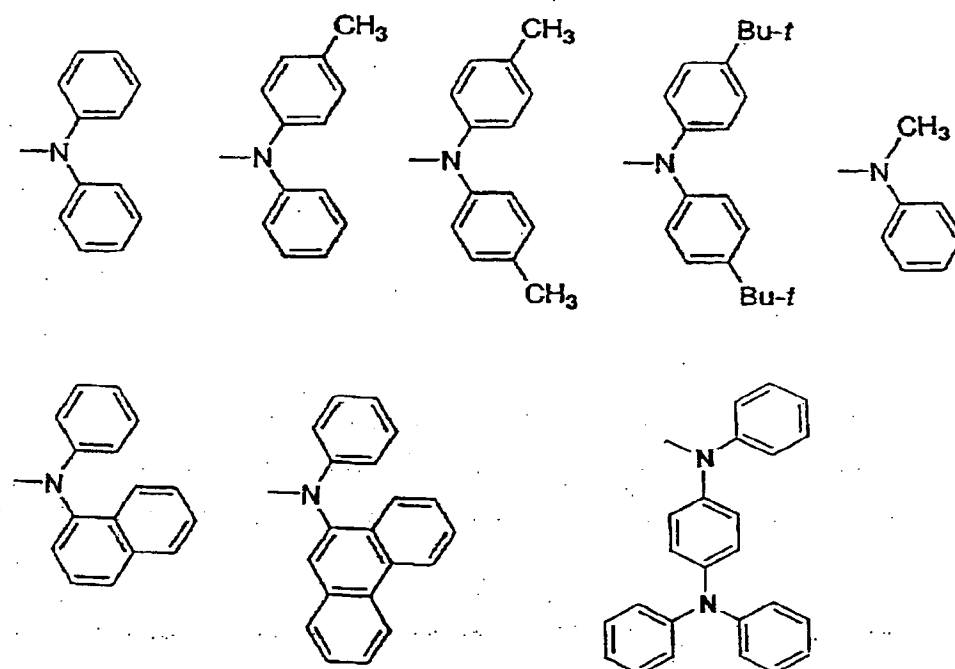


20

【0043】

アリールアミノ基 $-NAr^a Ar^b$ 、 $-NAr^c Ar^d$ の例として、好ましくは下記の基が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【化21】



30

40

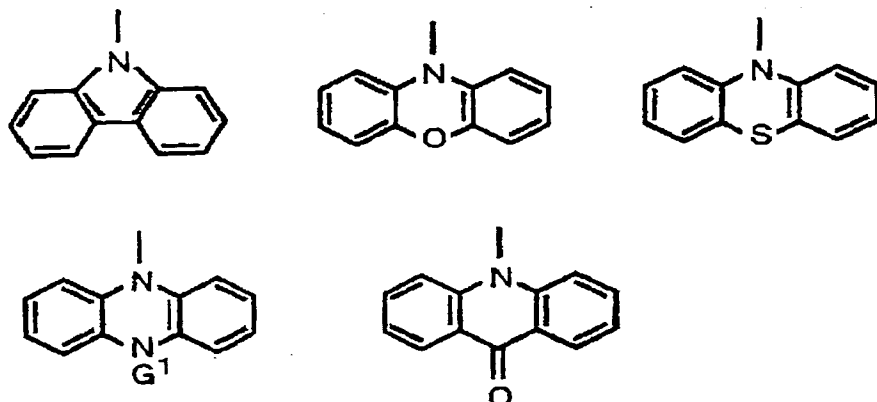
【0044】

また、 Ar^a と Ar^b 、および/または Ar^c と Ar^d が互いに直接結合、もしくは置換基を介して結合し、縮合環を形成していても良く、この縮合環は置換されていても良い。このような縮合環の構造式を以下に示すが、これらに限定されるものではない。なお、下記の例示では記載を省略したが、いずれも置換基を有していても良い。該置換基については後述する。

50

【0045】

【化22】



10

(上記式中、 G^1 は水素原子、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基またはフェニル基を表す。)

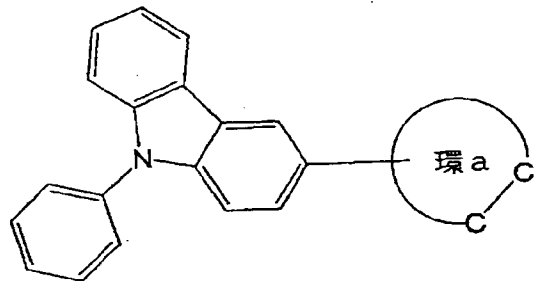
【0046】

さらに、 Z^a が 2 価または 3 価の連結基を表す場合、 Ar^a と Z^a 、および/または Ar^b と Z^a が互いに結合して、置換基を有していても良い環を形成していても良く、 Z^b が 2 価または 3 価の連結基を表す場合、 Ar^c と Z^b 、および/または Ar^d と Z^b が互いに結合して、置換基を有していても良い環を形成していても良い。その一例を以下に示すが、これに限定されるものではない。

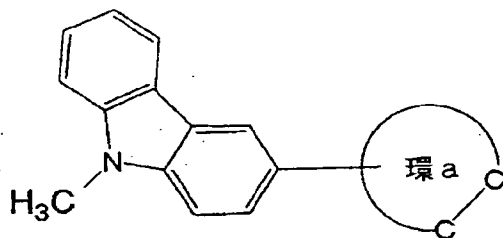
20

【0047】

【化23】



30



40

上記例上では、連結基 Z^a (フェニレン基) に、 Ar^a (フェニル基) および Ar^b (フェニル基) の一方が結合し、環 (カルbazolリル基) を形成している。上記例下では、連結基 Z^a (フェニレン基) に、 Ar^b (フェニル基) が結合して環 (カルbazolリル基) を形成しており、 Ar^a はメチル基である。

【0048】

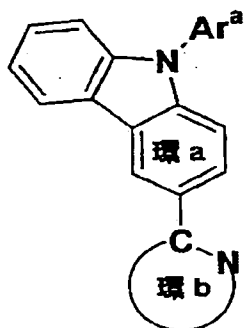
また、 Z^a が直接結合の場合、 Ar^a と環 a、および/または Ar^b と環 a が結合して、

50

置換基を有していても良い環を形成していても良く、 Z^b が直接結合の場合、 Ar^c と環 b 、および／または Ar^d と環 b が結合して、置換基を有していても良い環を形成していても良い。その一例を以下に示すが、これに限定されるものではない。

【0049】

【化24】



10

(上記例では、環 a (ベンゼン環) に Ar^b (フェニル基) が結合し、全体として環 (カルバゾリル基) を形成している。なお、環 b における置換基は記載を省略した。)

【0050】

ところで、一般式 (1) で表される有機金属錯体は、アリールアミノ基 $-NAr^a Ar^b$ 、 $-NAr^c Ar^d$ を有することにより、発光効率の向上など種々の優れた性質を示すと共に、該アリールアミノ基を有さない有機金属錯体と比べて、発光波長が長波長化する傾向がある。前述したように、本錯体を、長波長発光する有機電界発光素子に使用する場合、これが利点の一つとなる。

20

【0051】

一方で、一般式 (1) におけるアリールアミノ基 $-NAr^a Ar^b$ 、 $-NAr^c Ar^d$ と、環 a 、環 b 、連結基 Z^a 、 Z^b などが結合し、カルバゾリル基を形成している化合物は、 $-NAr^a Ar^b$ 、 $-NAr^c Ar^d$ を有さない化合物と比較して、それ程発光波長が長波長化することなく、発光効率が向上するという特徴を有する。これは、比較的短波長の発光を示す素子を得たい場合にも使用でき、適用範囲が広い点において好ましい。この様な効果は、当該化合物と同様にカルバゾリル基を有する化合物を、後述する宿主材料として併用することにより、更に顕著にあらわれる。

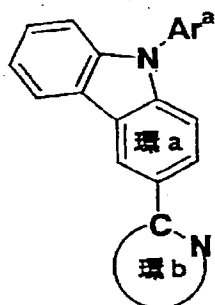
30

【0052】

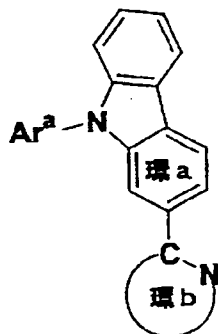
中でも、 Z^a が直接結合であり、 Ar^a または Ar^b が環 a と結合し、全体としてカルバゾリル基を形成する場合が、より好ましい。環 a を含んで形成されるカルバゾリル基の環 b に対する位置や向きは、幾つか考えられるが、例えば下記構造が挙げられる。

【0053】

【化25】



(13)



(14)

10 -

【0054】

このうち、上記式(14)の構造を有する配位子の場合、カルbazolリル基の2-位に置換基(環b)が導入されている。しかし実際には、カルbazol環に対する置換反応時の反応性を考慮すると、2-位への置換基導入は難しいため、工業的な製造という面では、上記式(13)として例示したように、3-位(または6-位)に環bを置換させることにより得られる構造が好ましい。

20

【0055】

一般式(1)において、環aは置換基を有していても良い、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を示し、環bは置換基を有していても良い芳香族複素環基を表す。いずれも、好ましくは5員環または6員環の、単環または2縮合環である。

【0056】

ところでヘテロ原子を含む5員環は、他の芳香族化合物や複素環の中でも反応性が高く、特に、ヘテロ原子の α -位は非常に反応活性が高い(たとえば求電子置換反応、プロトン化、ディールスアルダー反応などの反応性を示す)。

【0057】

有機電界発光素子の材料として、配位子中に、ヘテロ原子の α -位が無置換である5員環を含む錯体化合物を使用すると、素子の安定性が低下したり、発光効率の本発明の低下や低寿命化の原因となる虞がある。よって、前記一般式(1)で表される有機電界発光素子における、環aおよび/または環bが5員環の芳香族複素環である(またはこれを含む)場合には、 α -位へ置換基を導入することが好ましい。また、 α -位の基と隣接する基が結合して、該5員環に縮合する環を形成していても良い。

30

【0058】

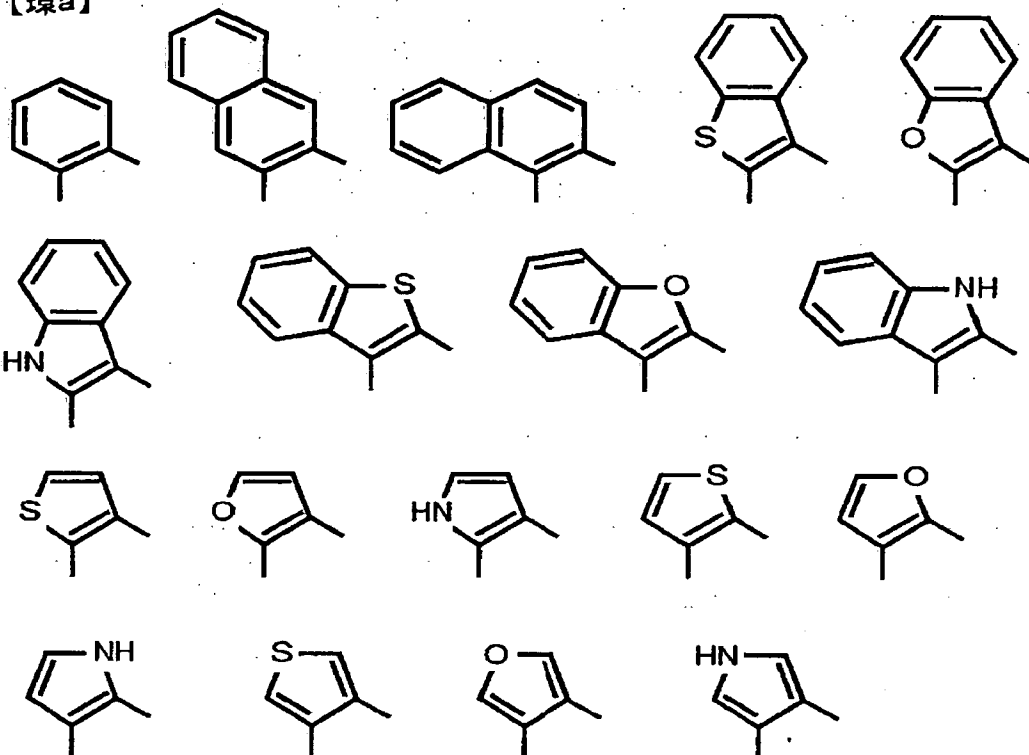
以下に環aおよび環bの具体例を示すが、これらに限定されるものではない。また、これらは置換基を有していても良く、該置換基については後述する。

【0059】

【化26】

40

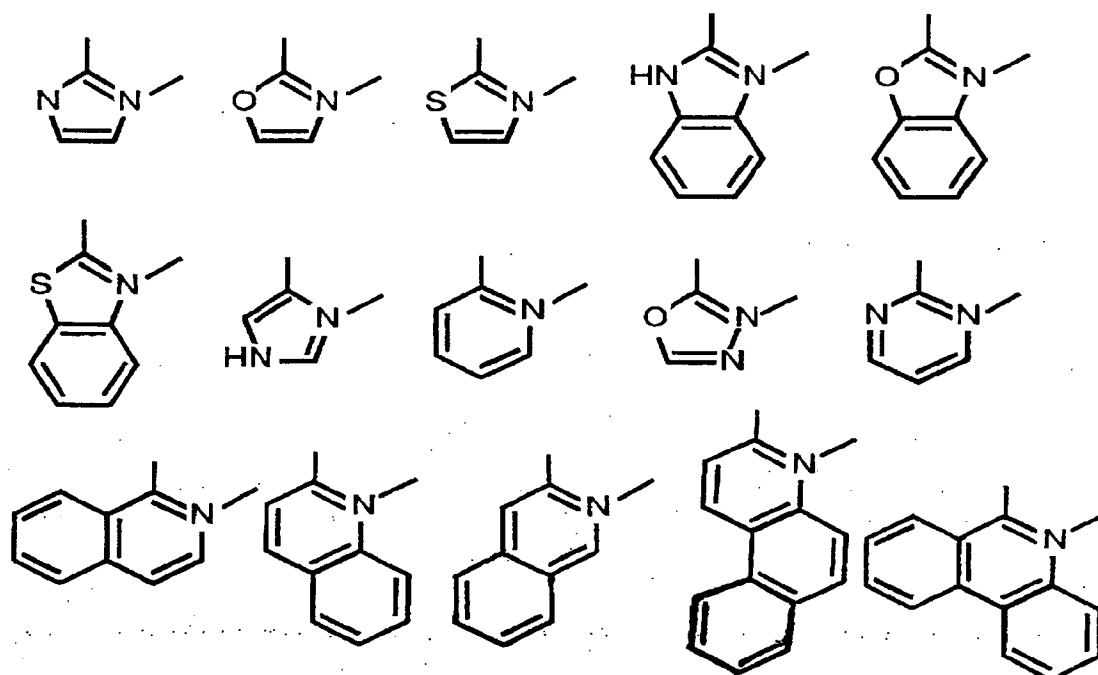
【環a】



10

20

【環b】



30

40

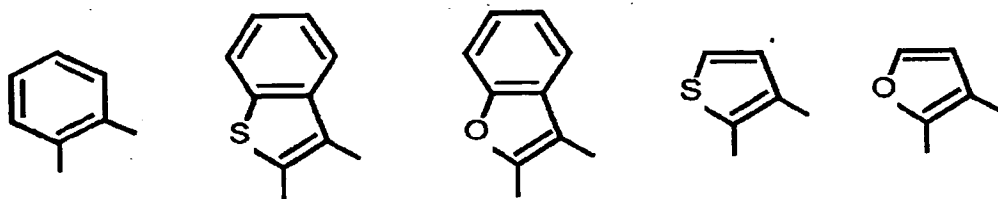
【0060】

これらのうち、環 a としては、好ましくは以下のようなものが挙げられ、環 b としては、好ましくは以下のようなものが挙げられ、これらは後述の置換基を有していても良い。

【0061】

【化27】

[環a]

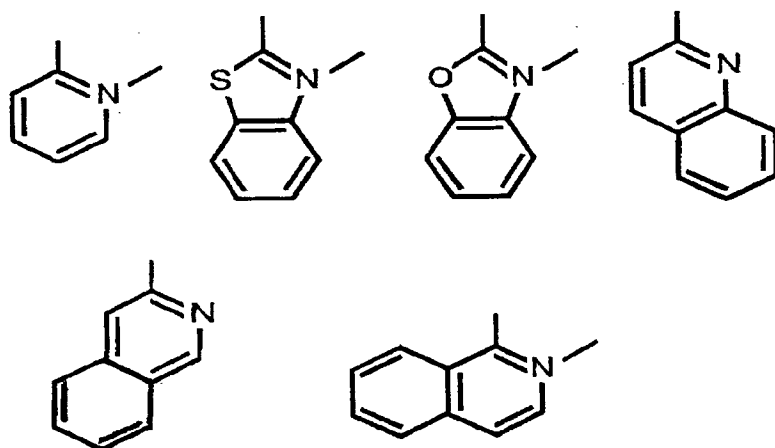


10 -

【0062】

【化28】

[環b]



20

【0063】

Ar^a ないし Ar^d、環 a および環 b が有しうる置換基として、具体的には下記の基が挙げられる。

30

【0064】

ハロゲン原子（たとえばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子）

置換基を有していても良いアルキル基（好ましくは炭素数 1～8 の直鎖または分岐のアルキル基であり、たとえばメチル、エチル、n-プロピル、2-プロピル、n-ブチル、イソブチル、tert-ブチル基などが挙げられる。）

置換基を有していても良いアルケニル基（たとえば、炭素数 1～8 のアルケニル基であり、たとえばビニル、アリル、1-ブテニル基などが挙げられる。）

置換基を有していても良いアルキニル基（たとえば、炭素数 1～8 のアルキニル基であり、たとえばエチニル、プロパルギル基などが挙げられる。）

40

置換基を有していても良いアラルキル基（たとえば、炭素数 1～8 のアラルキル基であり、たとえばベンジル基などが挙げられる。）

置換基を有していても良いアミノ基（好ましくは、置換基に炭素数 1～8 のアルキル基を 1 つ以上有するものであり、たとえばメチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ基などが挙げられる。）

置換基を有していても良いアリールアミノ基（たとえばフェニルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノ基などが挙げられる。）

置換基を有していても良いヘテロアリールアミノ基（たとえばピリジルアミノ、チエニルアミノ、ジチエニルアミノ基などが挙げられる。）

置換基を有していても良いアルコキシ基（好ましくは置換基を有していても良い炭素数 1

50

～ 8 のアルコキシ基であり、たとえばメトキシ、エトキシ、ブトキシ基などが挙げられる。)

置換基を有していても良いアリーロキシ基（好ましくは芳香族炭化水素基や複素環基を有するものであり、たとえばフェニロキシ、1-ナフチロキシ、2-ナフチロキシ、ピリジロキシ、チエニロキシ基などが挙げられる。)

置換基を有していても良いアラルキルオキシ基（たとえばベンジルオキシ、フェネチロキシ基等が挙げられる。)

置換基を有していても良いアシル基（好ましくは、置換基を有していても良い炭素数 1 ～ 8 のアシル基であり、たとえばホルミル基、アセチル基、ベンゾイル基などが挙げられる。)

置換基を有していても良いアルコキシカルボニル基（好ましくは置換基を有していても良い炭素数 2 ～ 13 のアルコキシカルボニル基であり、たとえばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル基などが挙げられる。)

置換基を有していても良いアリーロキシカルボニル基（好ましくは置換基を有していても良い炭素数 2 ～ 13 のアリーロキシカルボニル基であり、たとえばアセトキシ基などが挙げられる。)

カルボキシ基

シアノ基

水酸基

メルカプト基

アルキルチオ基（好ましくは炭素数 1 ～ 8 のアルキルチオ基であり、たとえば、メチルチオ基、エチルチオ基などが含まれる。)

アリールチオ基（好ましくは炭素数 1 ～ 8 のアリールチオ基であり、たとえば、フェニルチオ基、1-ナフチルチオ基などが挙げられる。)

置換基を有していても良いスルホニル基（たとえばメシル、トシル基などが挙げられる。)

置換基を有していても良いシリル基（たとえばトリメチルシリル基、トリフェニルシリル基などが挙げられる。)

置換基を有していても良いボリル基（たとえばジメチルボリル基などが挙げられる。)

置換基を有していても良いホスフィノ基（たとえばジフェニルホスフィノ基などが挙げられる。)

置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基（好ましくは、5 または 6 員環の、単環または 2 縮合環である、芳香族炭化水素環または芳香族複素環であり、例えばフェニル基、ナフチル基、チエニル基、フリル基、ピリジル基などが挙げられる。)

【0065】

上述の各置換基が「有していても良い置換基」としては、

アルキル基（好ましくは炭素数 1 ～ 4 のアルキル基でありたとえばメチル基、エチル基、2-プロピル基などが挙げられる。)

無置換あるいはアルキル基で置換された芳香族炭化水素基（たとえばフェニル基、トリル基、メシチル基などが挙げられる。)

【0066】

上述の Ar^a ないし Ar^d 、環 a および環 b が有しうる置換基として、より好ましくは置換基を有していても良いアルキル基、置換基を有していても良いアミノ基、置換基を有していても良いアリールアミノ基、置換基を有していても良いアルコキシ基、置換基を有していても良いアシル基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素基、および置換基を有していても良い芳香族複素環基が挙げられる。

【0067】

また前述したように、 Ar^a と Z^a 、 Ar^b と Z^a 、 Ar^c と Z^b 、 Ar^d と Z^b 、 Ar^a と環 a、 Ar^b と環 a、 Ar^c と環 b、および Ar^d と環 b などが結合して形成する環

10

20

30

40

50

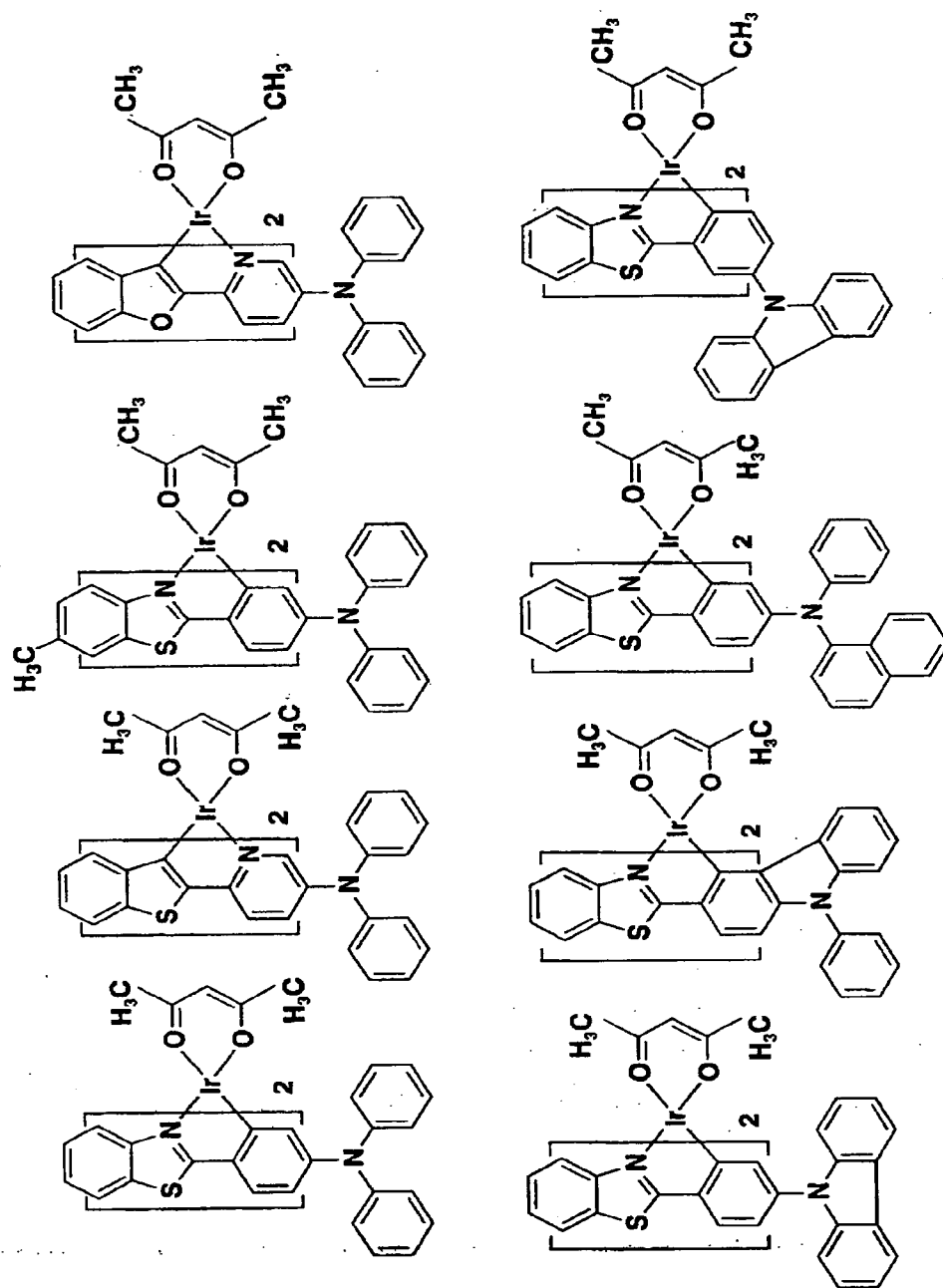
は、いずれも置換基を有していても良く、該置換基としては、環 a などの置換基として上述したものと同様の基が挙げられる。

【0068】

下記に、本発明の有機金属錯体の代表例を示すが、本発明の有機金属錯体は何らこれらに限定されるものではない（以下において、Et はエチル基である。）。

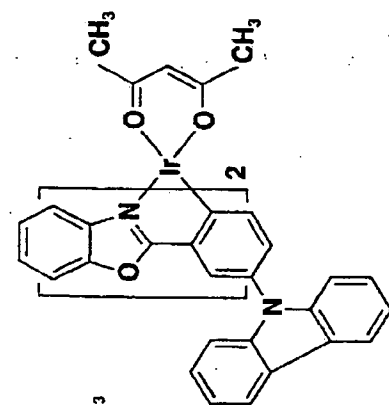
【0069】

【化29】

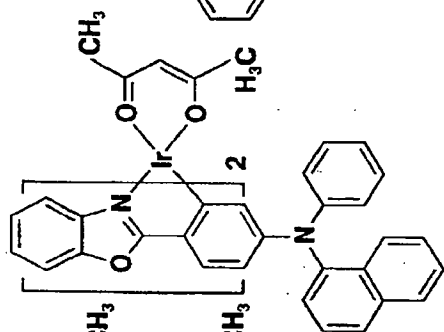


【0070】

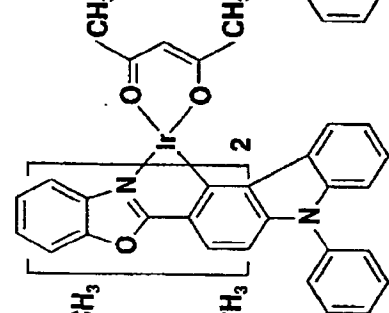
【化30】



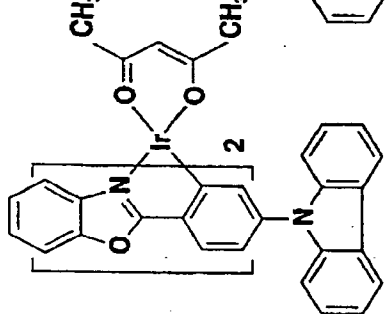
10



20



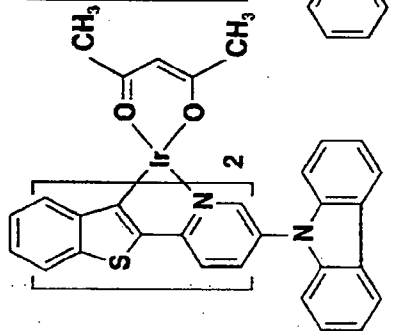
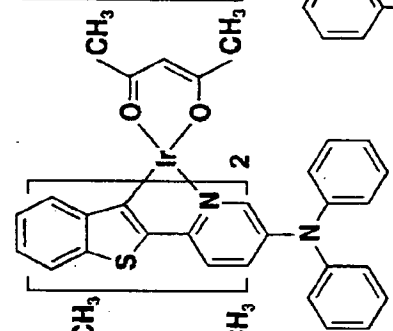
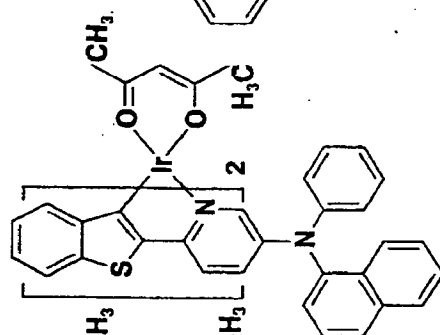
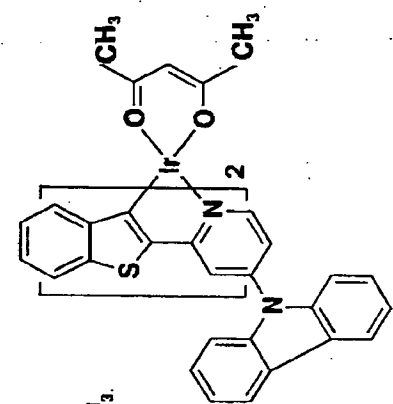
30

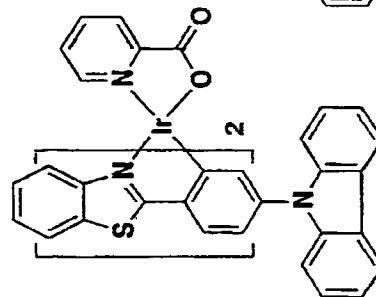
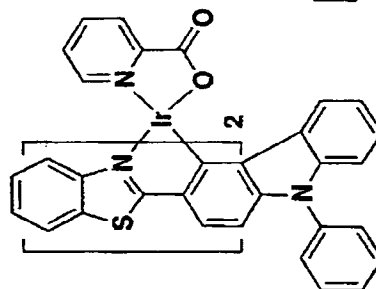
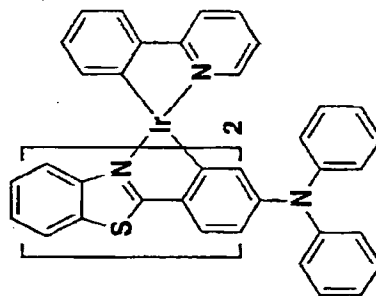
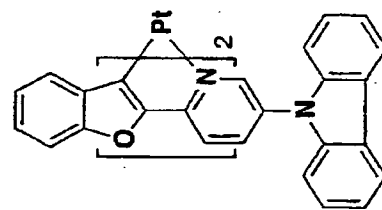
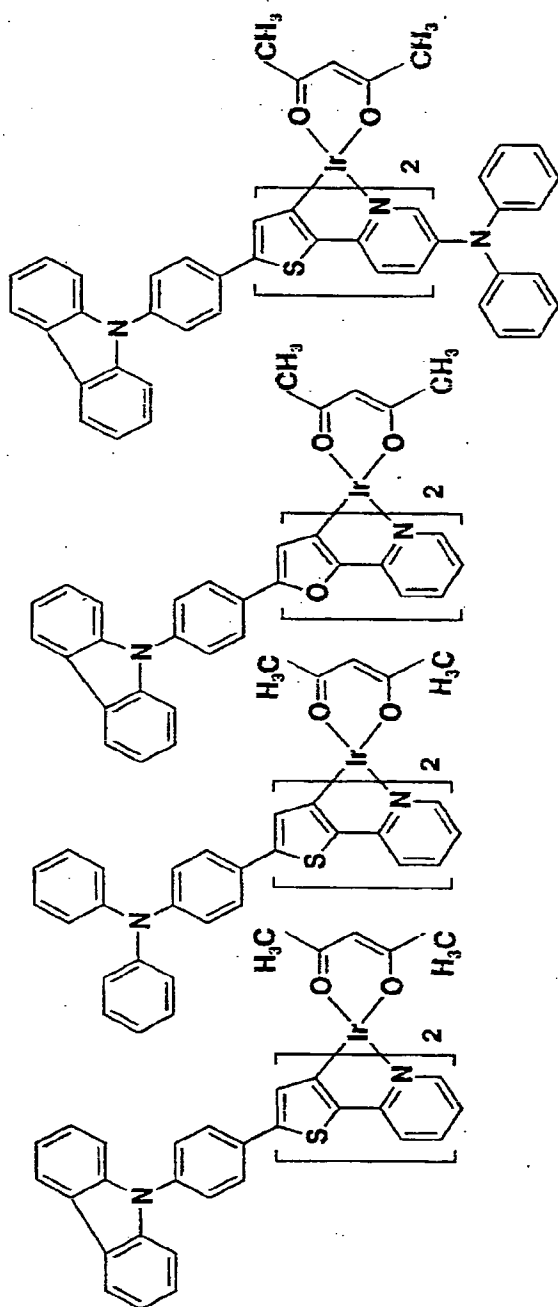


【 0 0 7 1 】

【 化 3 1 】

40





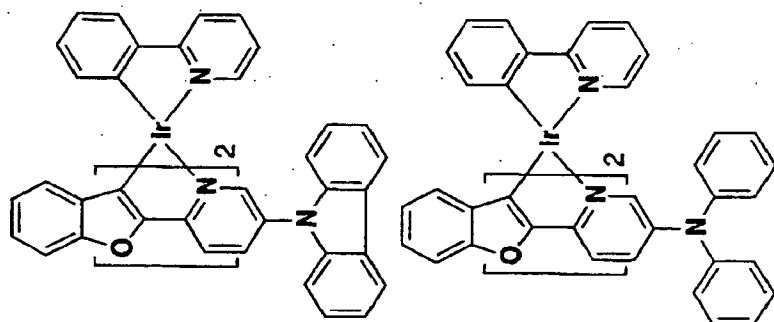
【 0 0 7 2 】
【 化 3 2 】

10

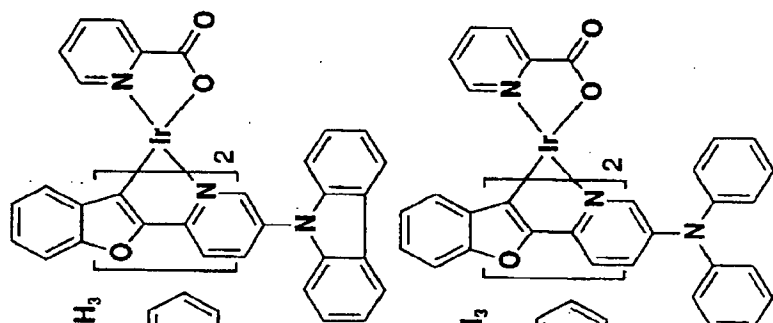
20

30

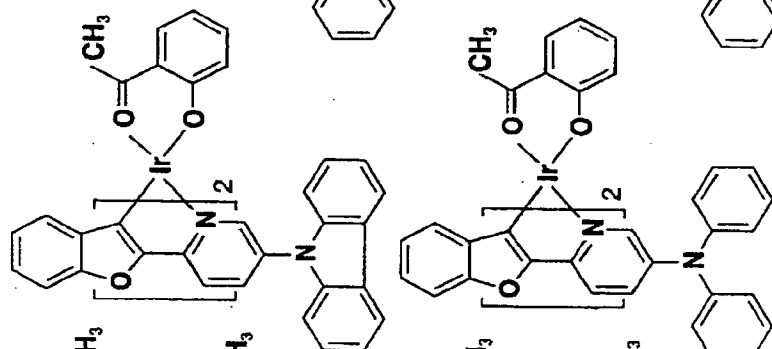
40



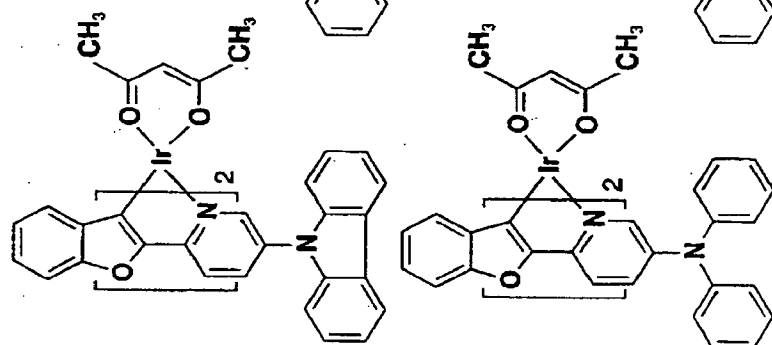
10



20



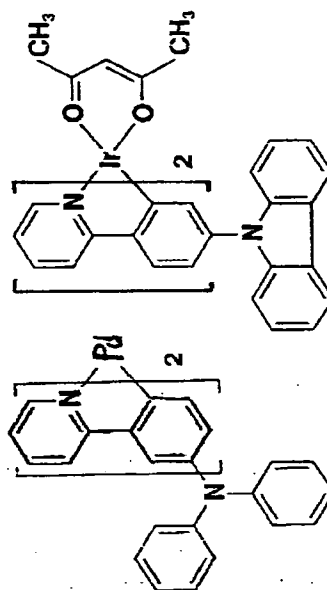
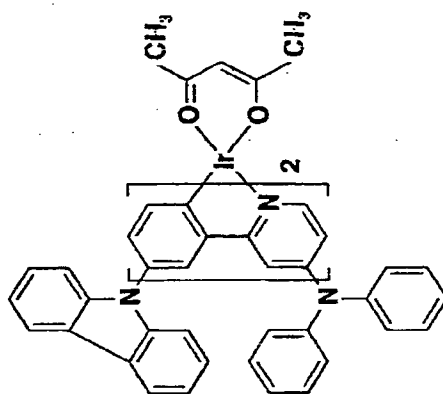
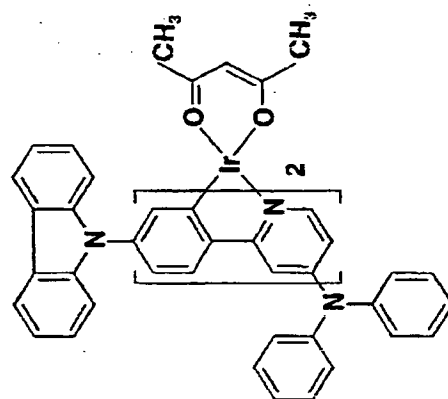
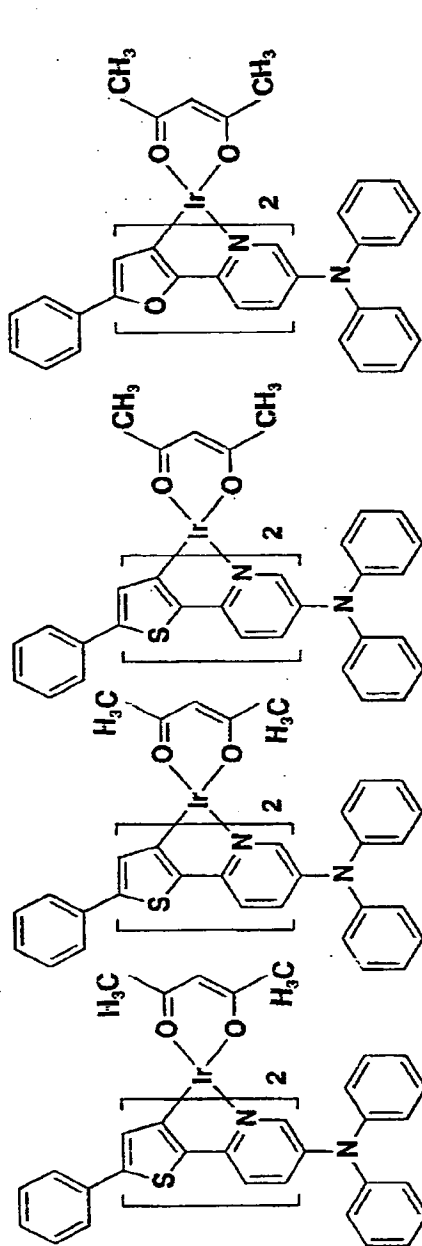
30



【 0 0 7 3 】

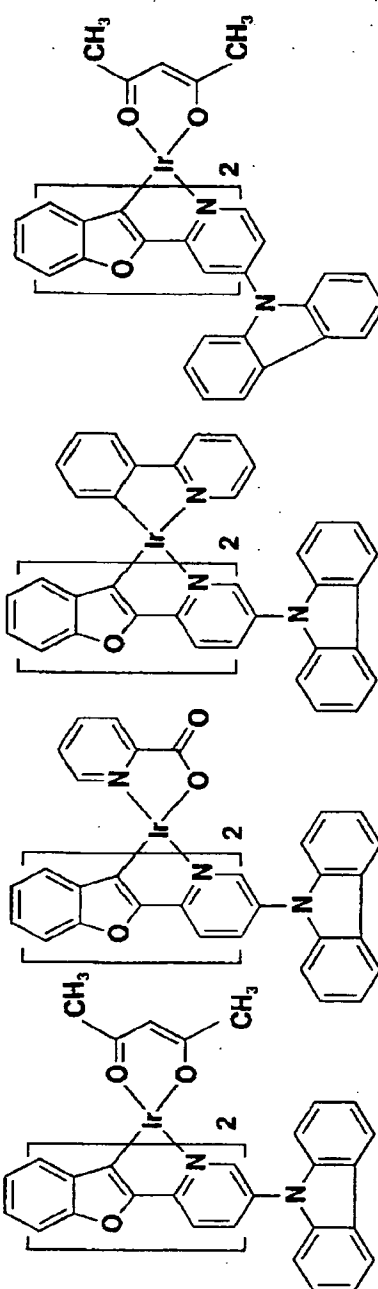
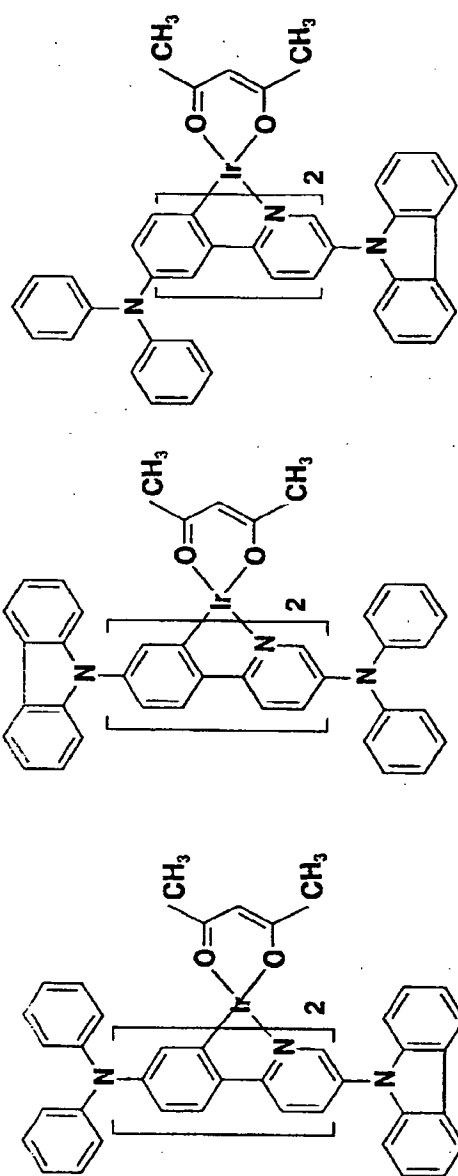
【 化 3 3 】

40



【 0 0 7 4 】

【 化 3 4 】



10

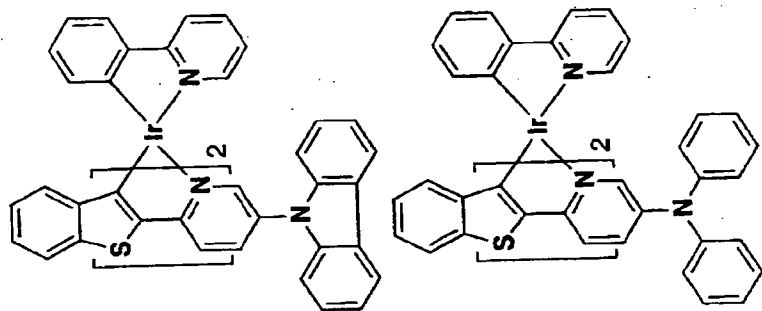
20

30

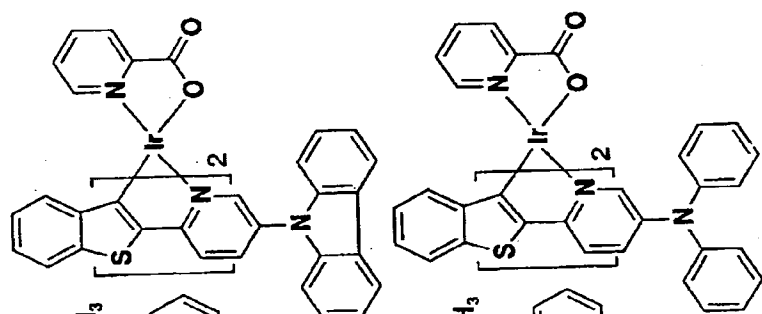
【 0 0 7 5 】

【 化 3 5 】

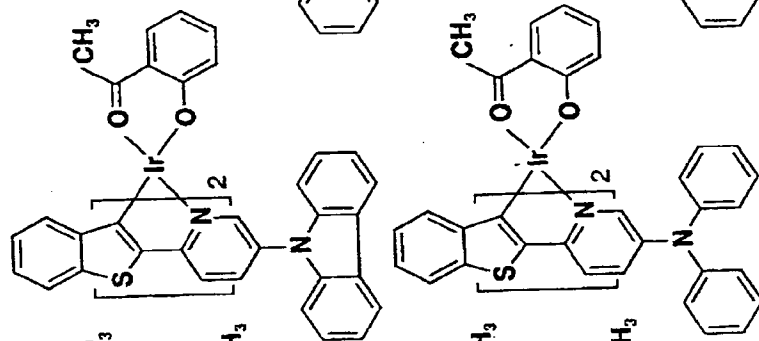
40



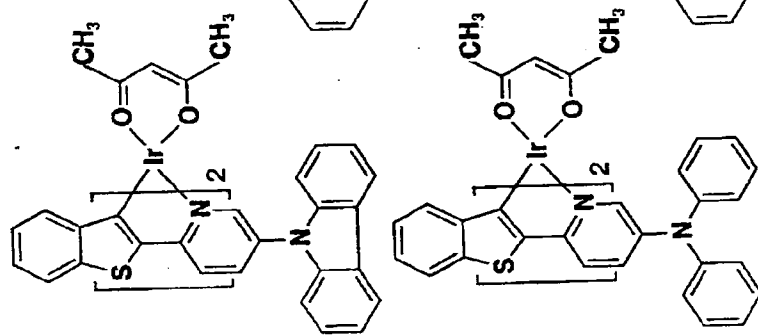
10



20

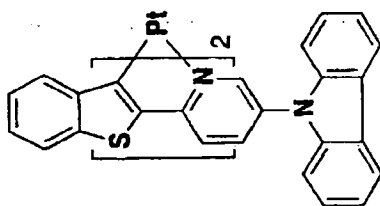
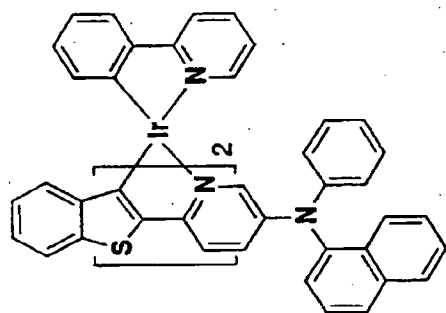


30

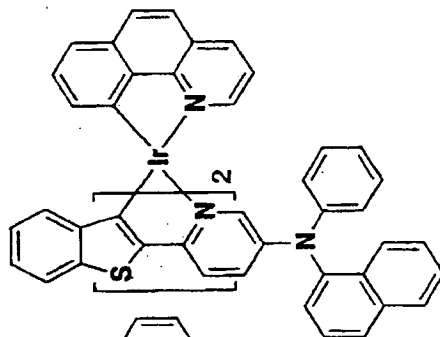
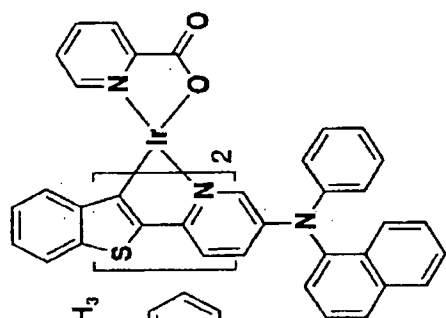


【 0 0 7 6 】

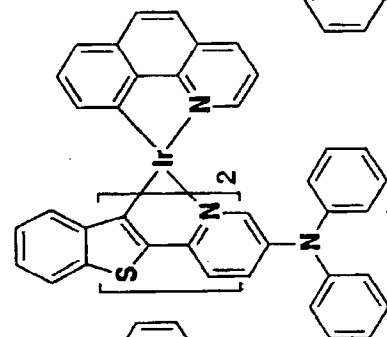
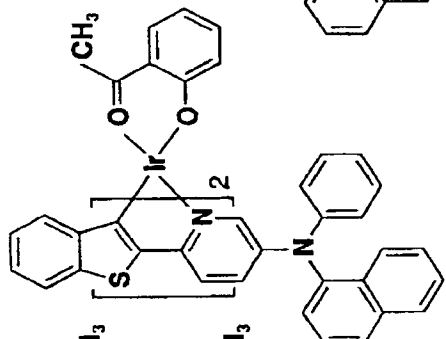
【 化 3 6 】



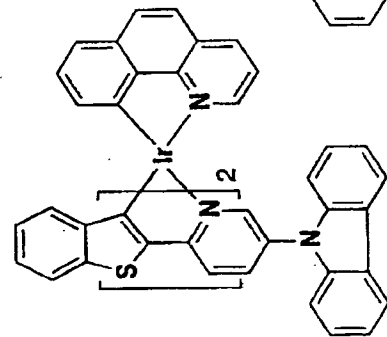
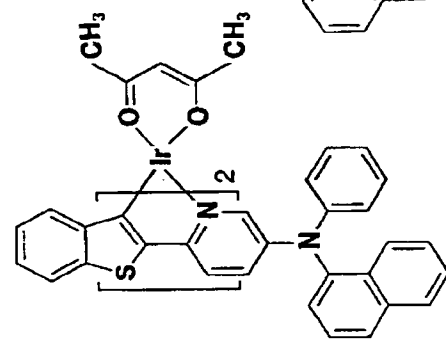
10



20

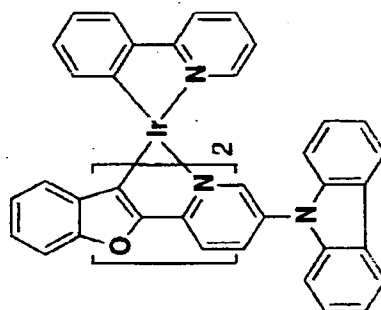


30

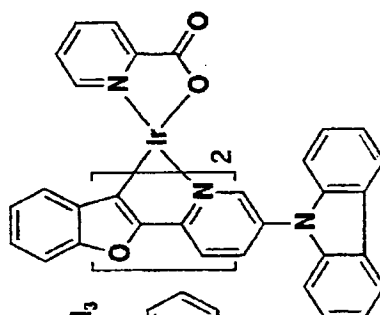


【 0 0 7 7 】

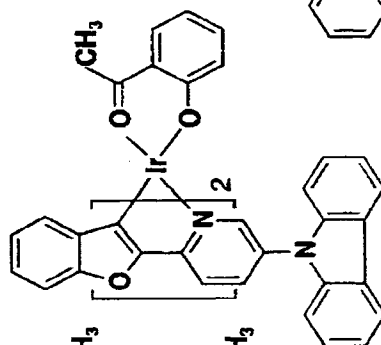
【 化 3 7 】



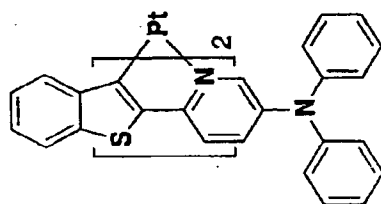
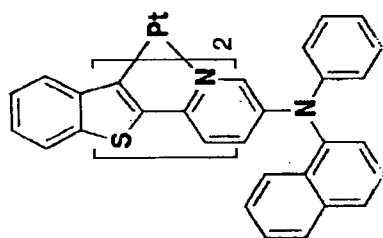
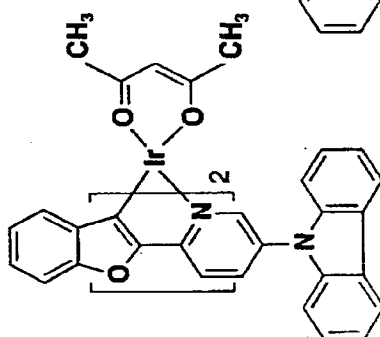
10 •



20 •



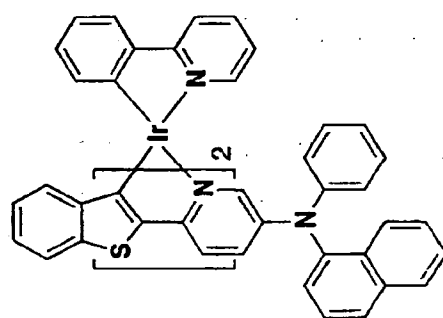
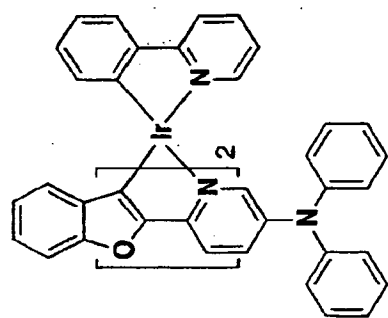
30 •



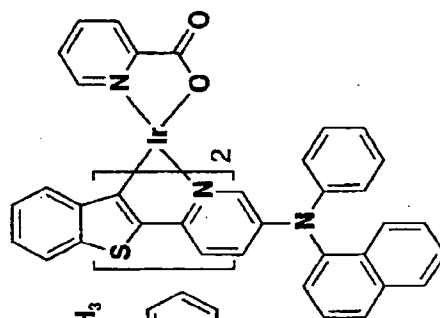
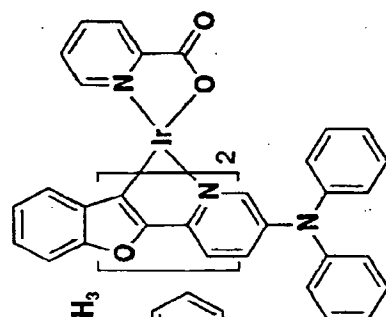
【 0 0 7 8 】

【 化 3 8 】

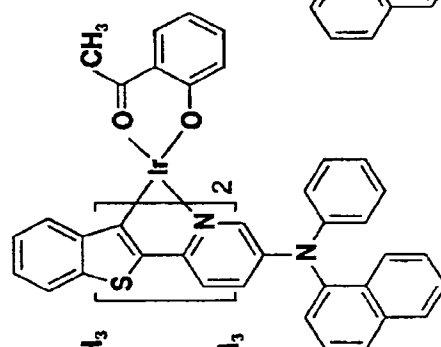
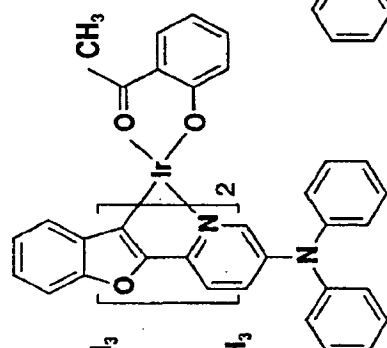
40 •



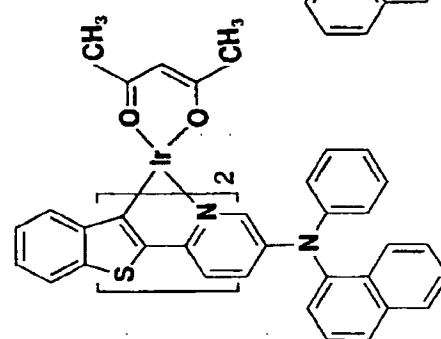
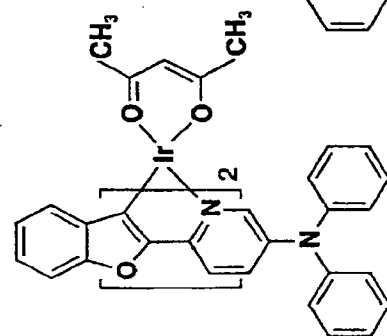
10



20



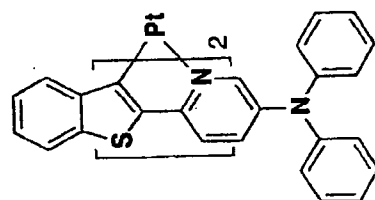
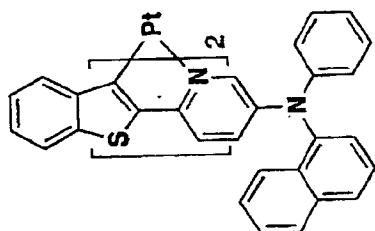
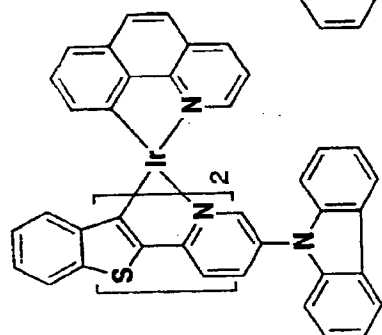
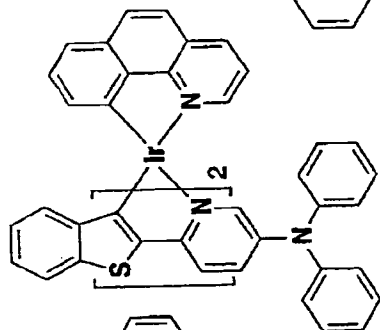
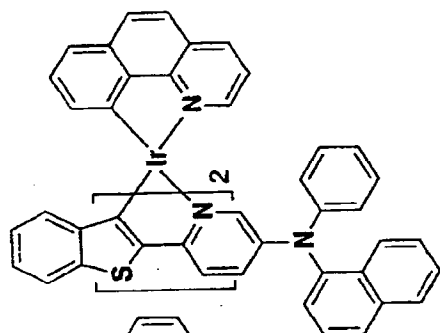
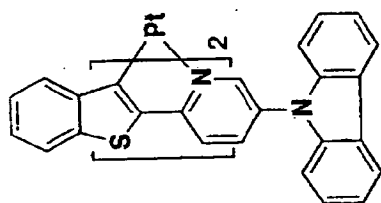
30



【 0 0 7 9 】

【 化 3 9 】

40



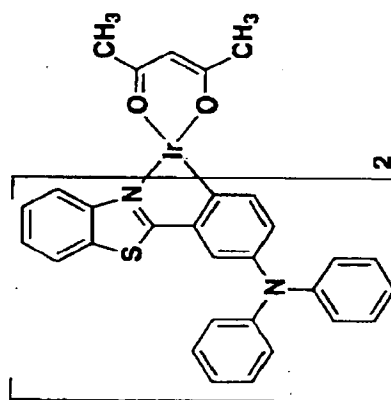
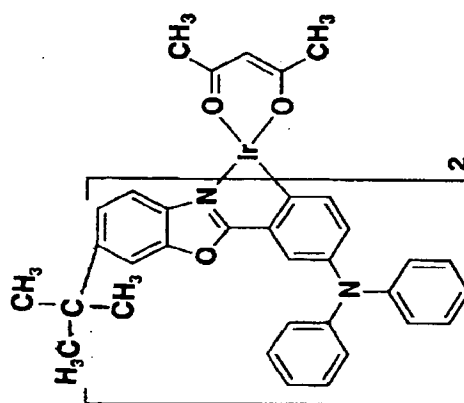
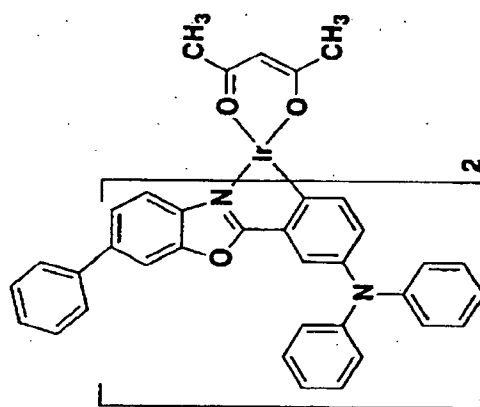
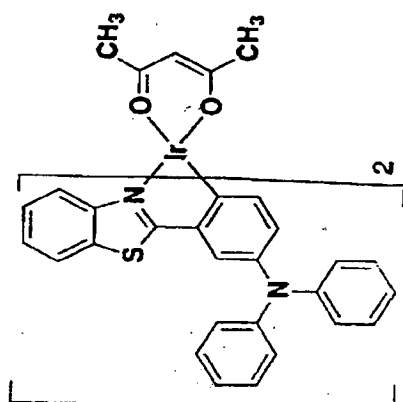
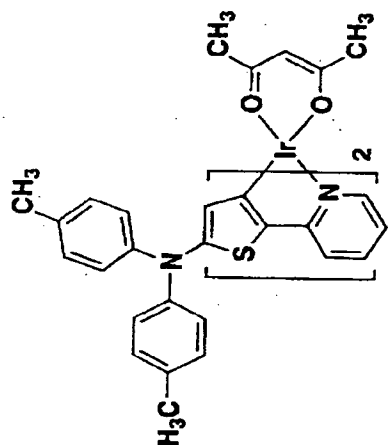
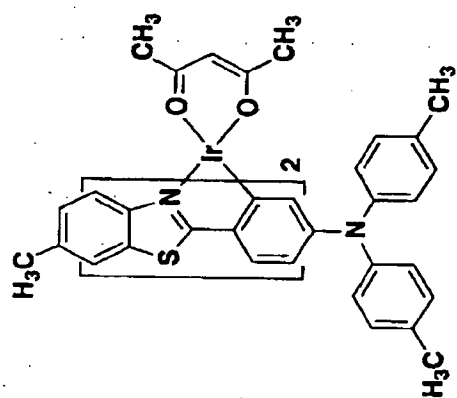
10 *

20

30

【 0 0 8 0 】

【 化 4 0 】



【 0 0 8 1 】

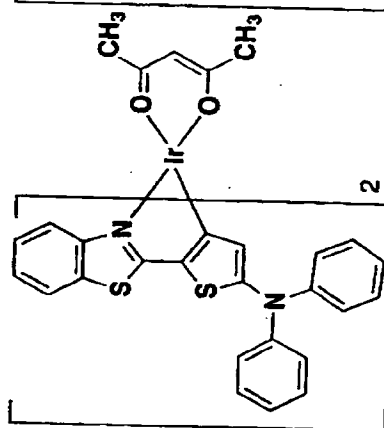
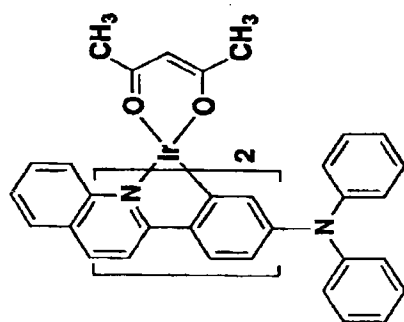
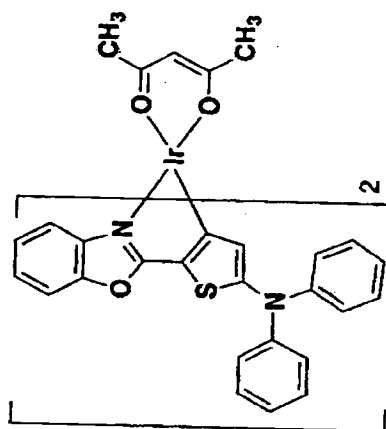
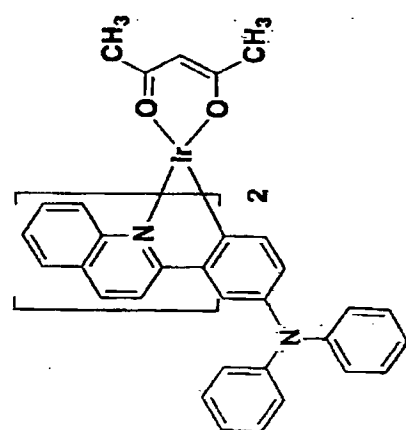
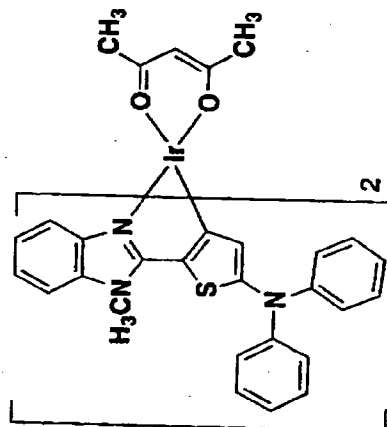
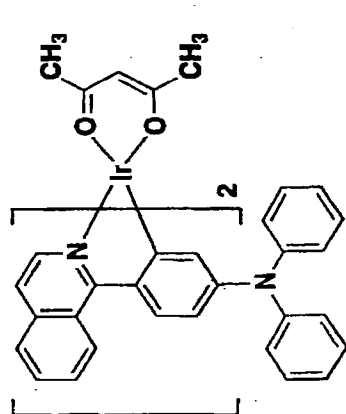
【 化 4 1 】

10

20

30

40



【 0 0 8 2 】

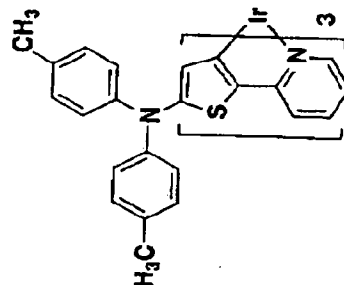
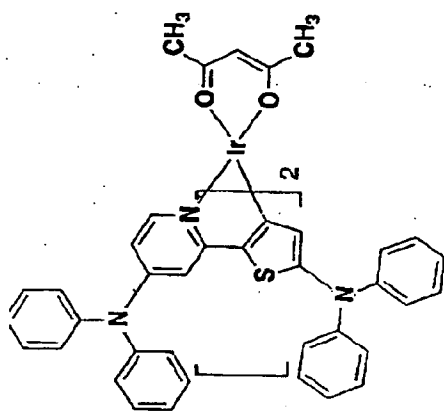
【 化 4 2 】

10 *

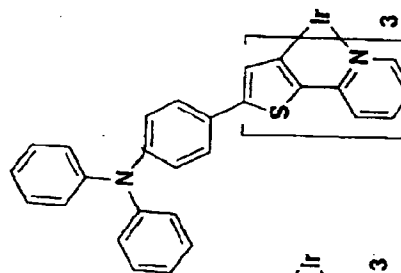
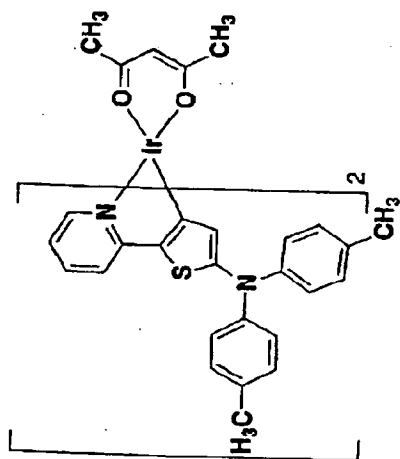
20

30

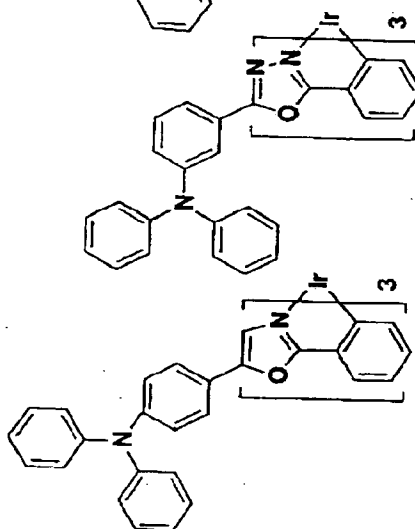
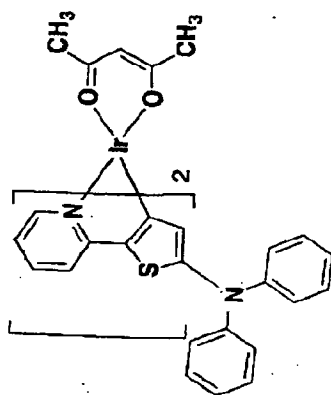
40



10



20

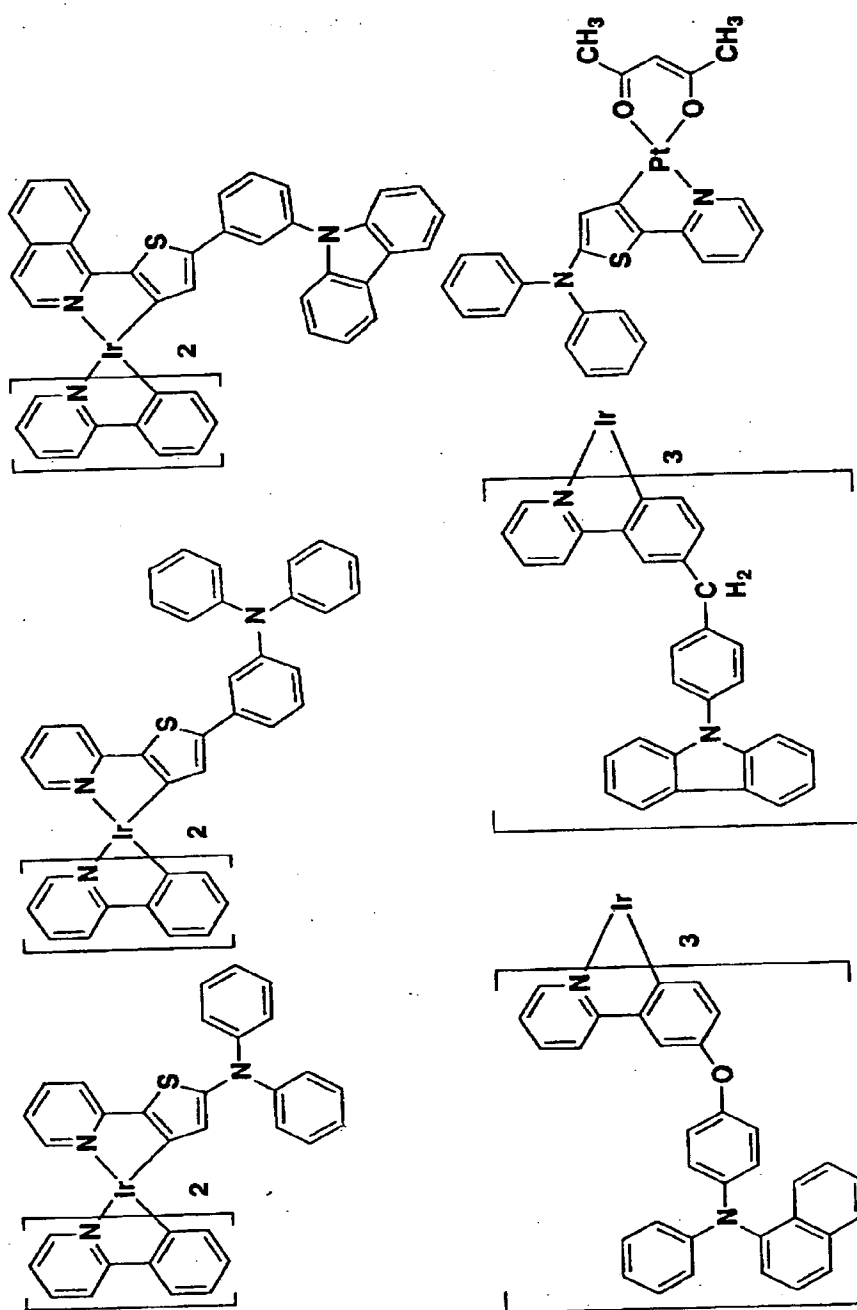


30

【 0 0 8 3 】

【 化 4 3 】

40



10 .

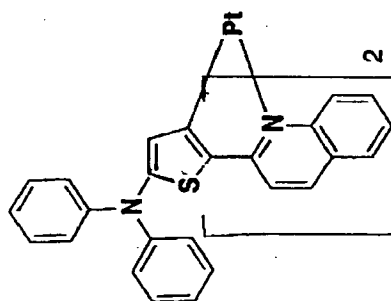
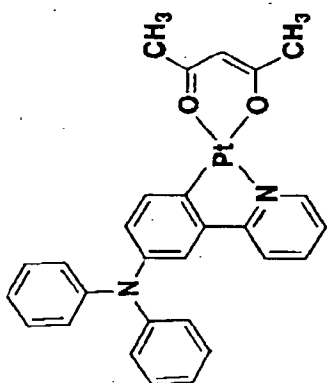
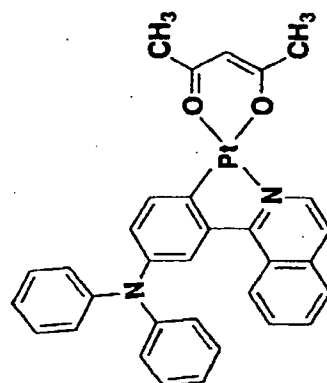
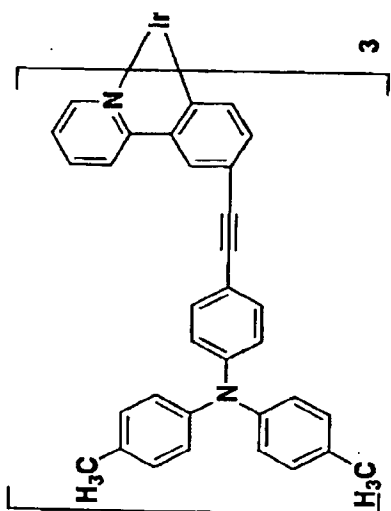
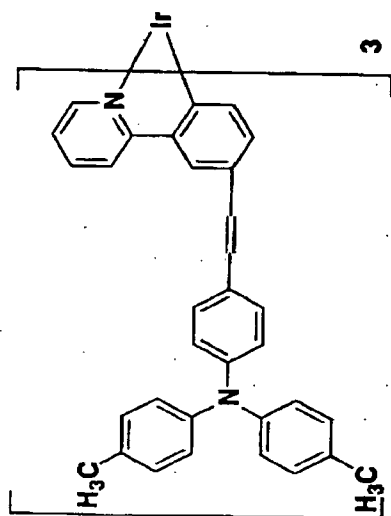
20

30

40

【 0 0 8 4 】

【 化 4 4 】



【 0 0 8 5 】

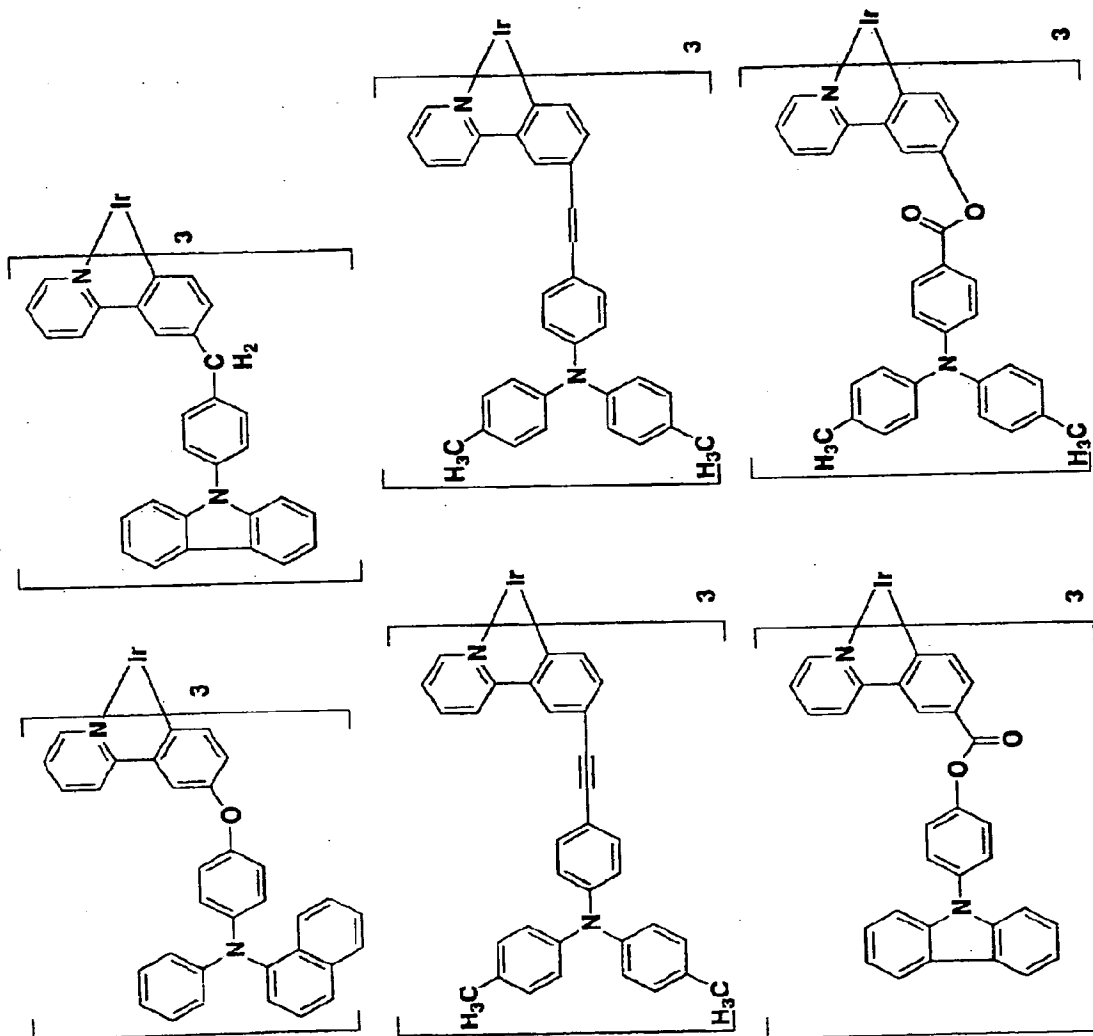
【 化 4 5 】

10

20

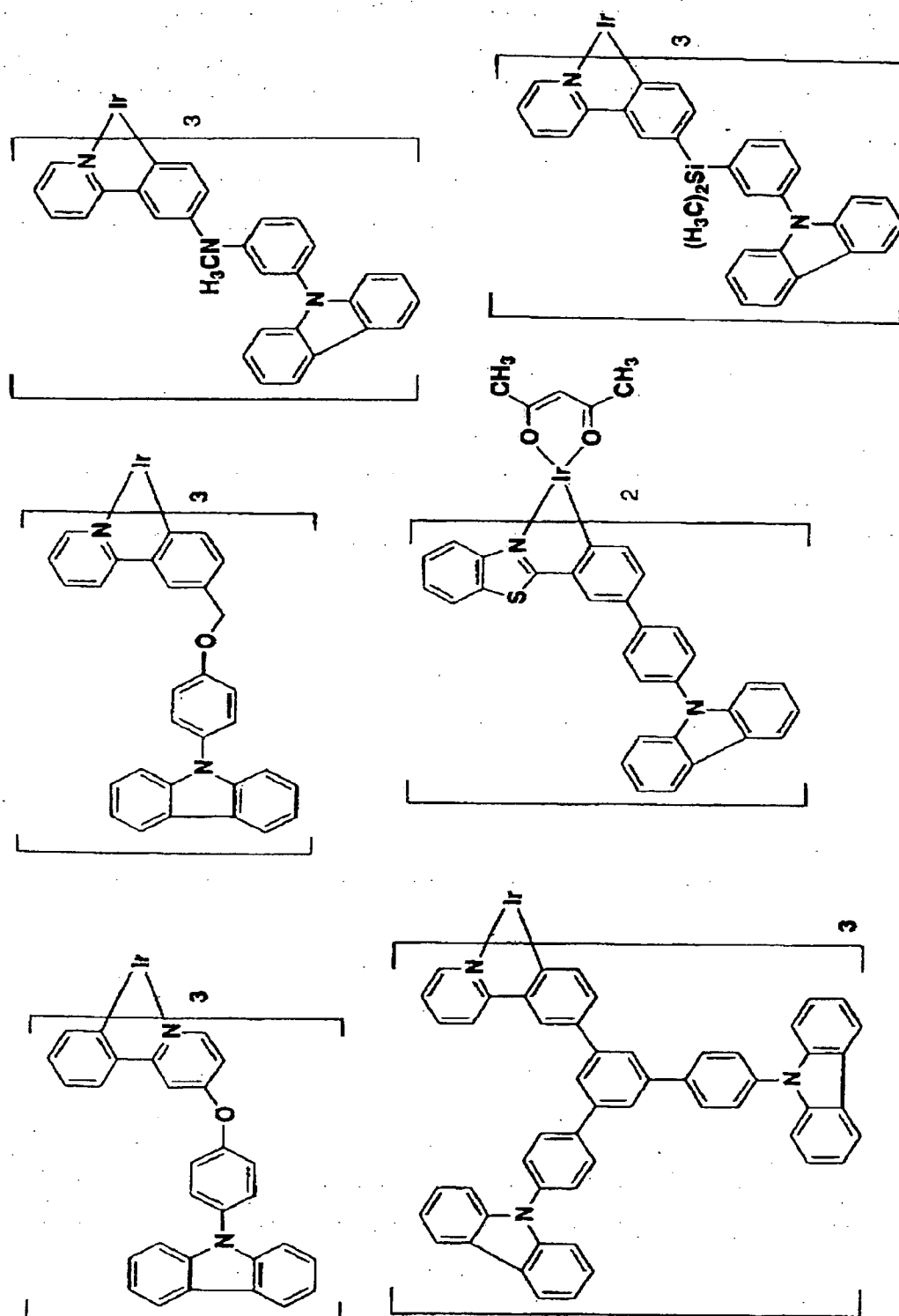
30

40



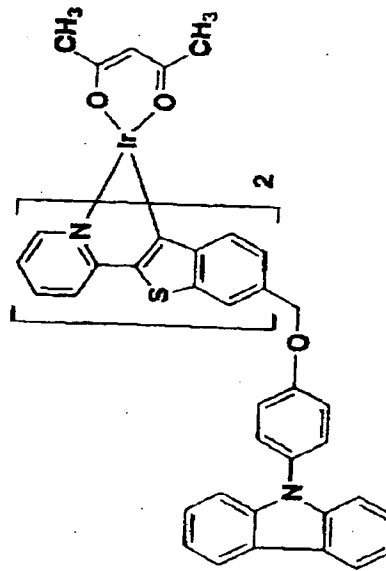
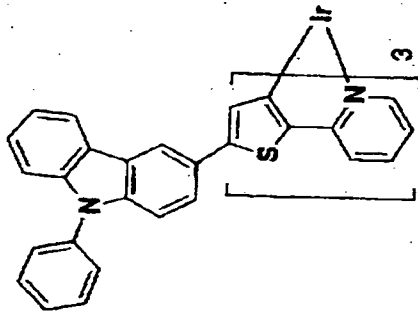
【 0 0 8 6 】

【 化 4 6 】

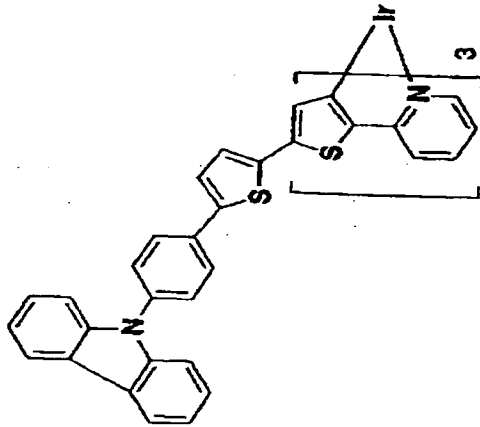


【 0 0 8 7 】

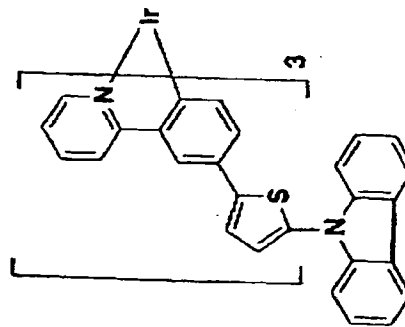
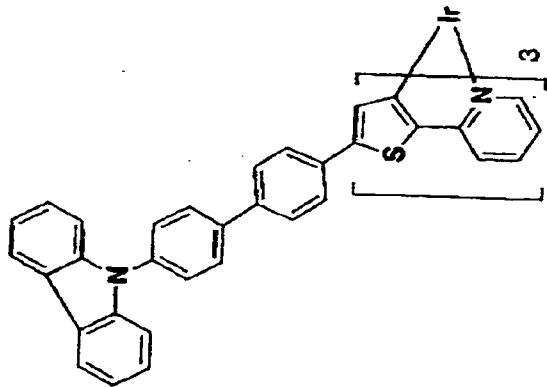
【 化 4 7 】



10



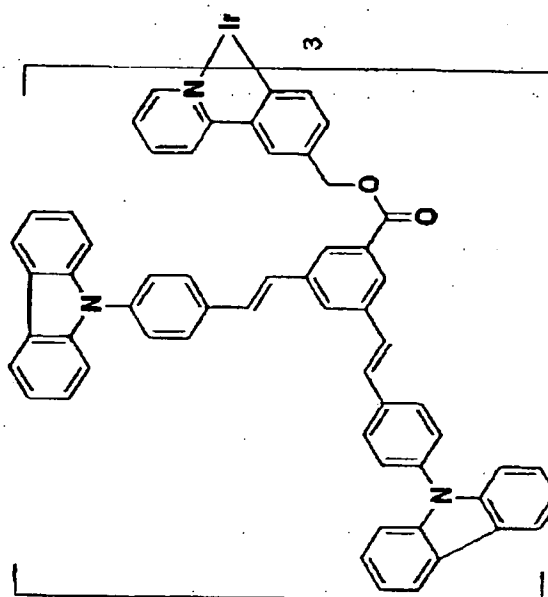
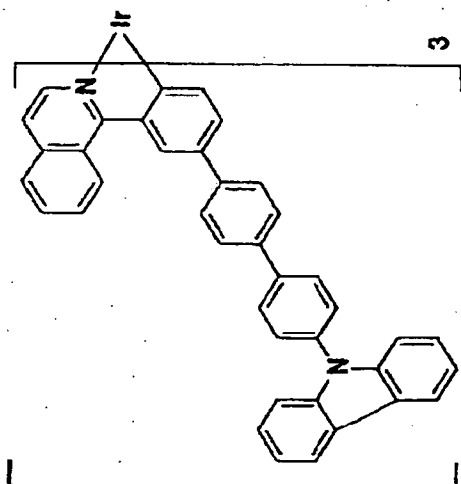
20



30

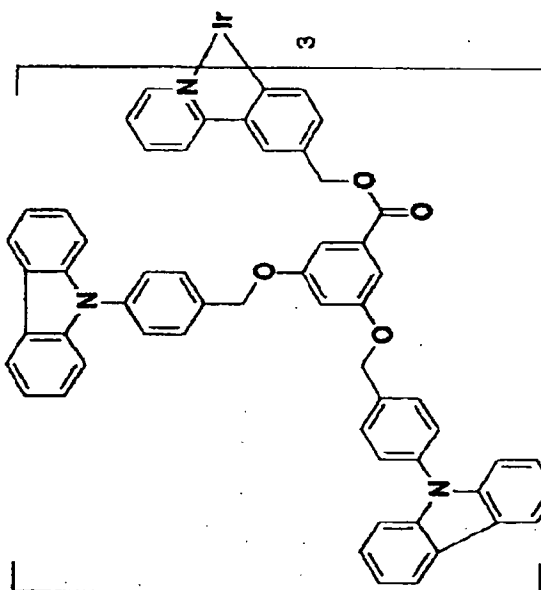
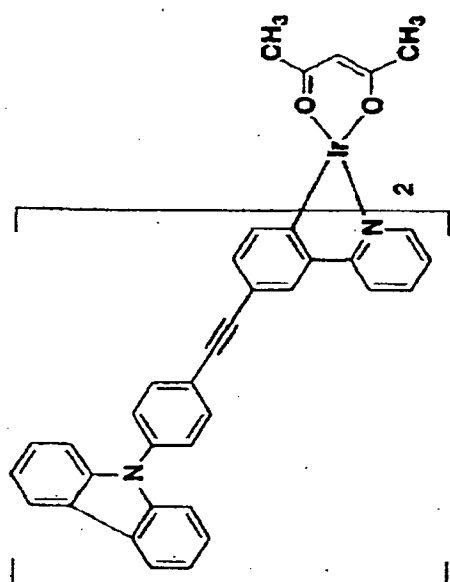
【 0 0 8 8 】

【 化 4 8 】



10

20



30

【 0 0 8 9 】

【 化 4 9 】

40

10

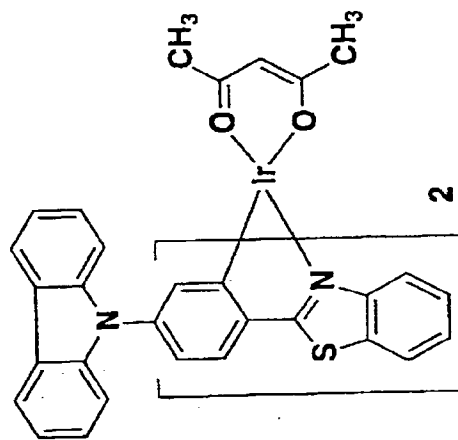
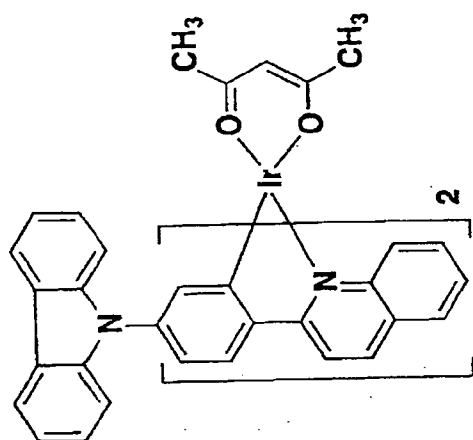
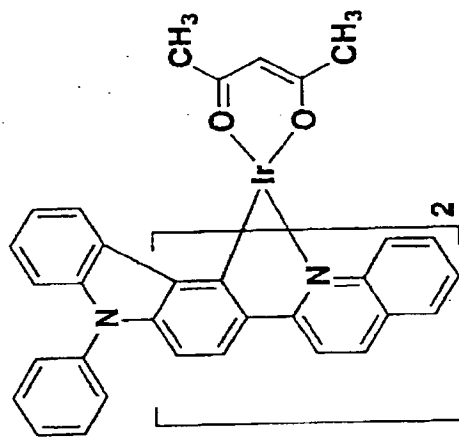
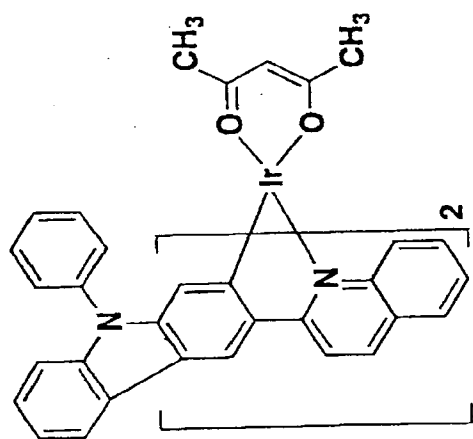
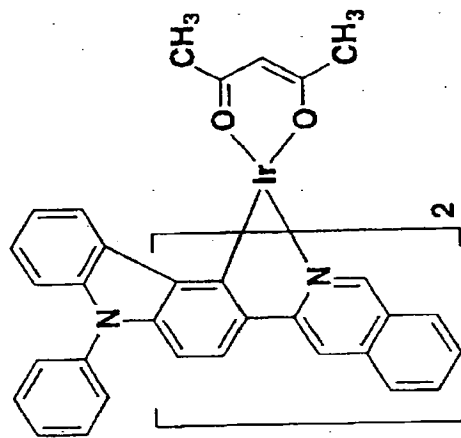
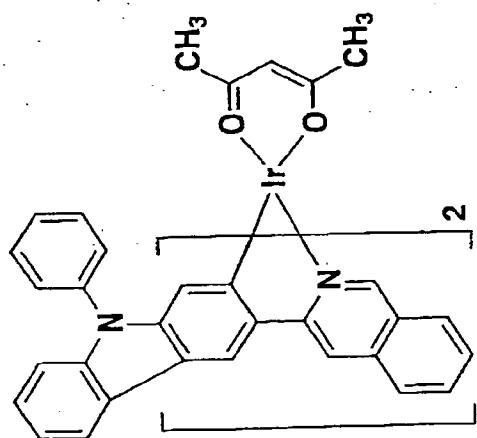
20

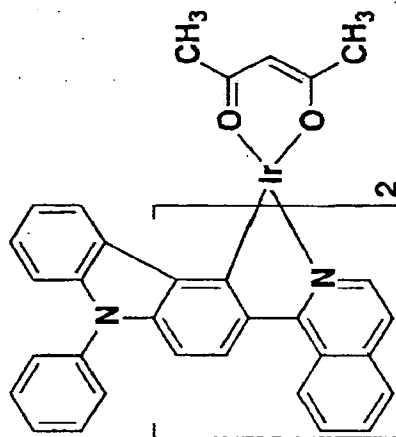
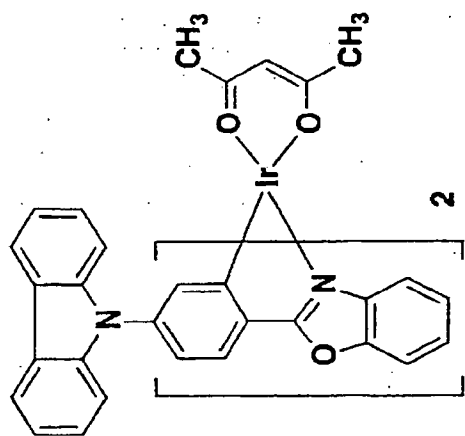
30

40

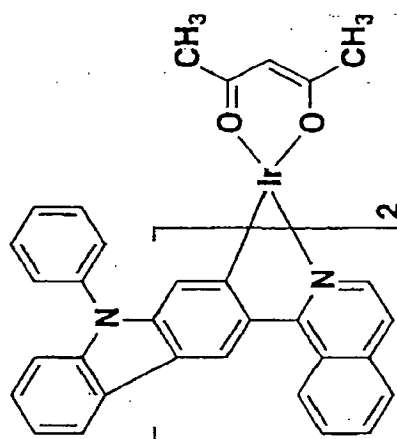
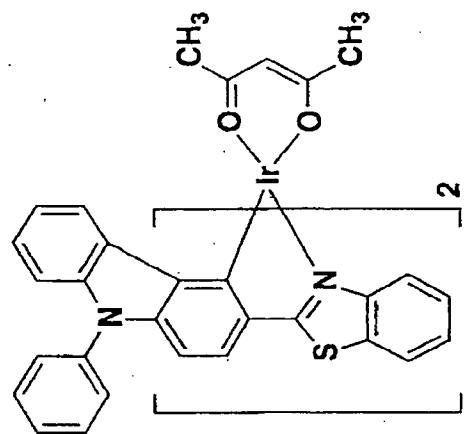
【0090】

【化50】

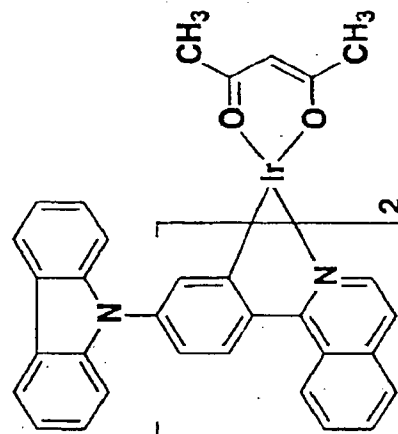
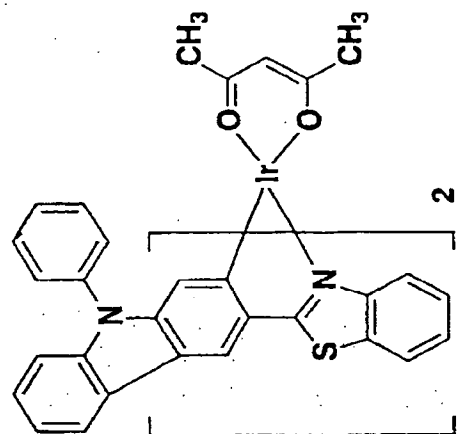




10



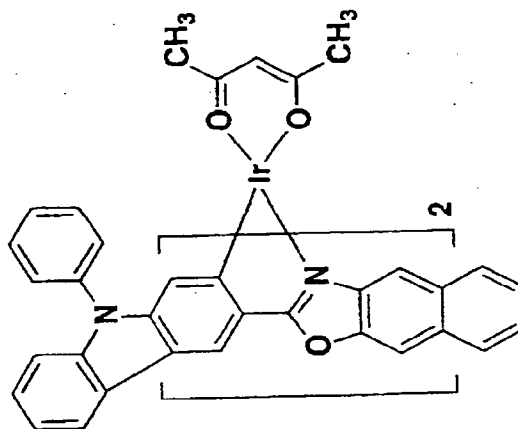
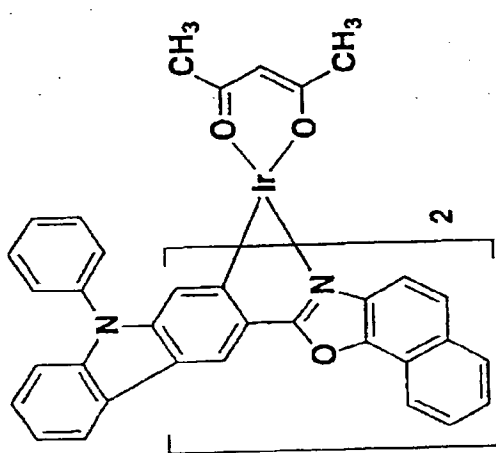
20



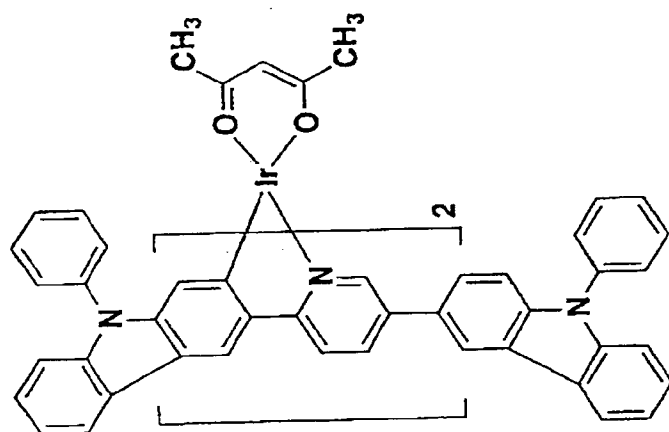
30

【0091】
【化51】

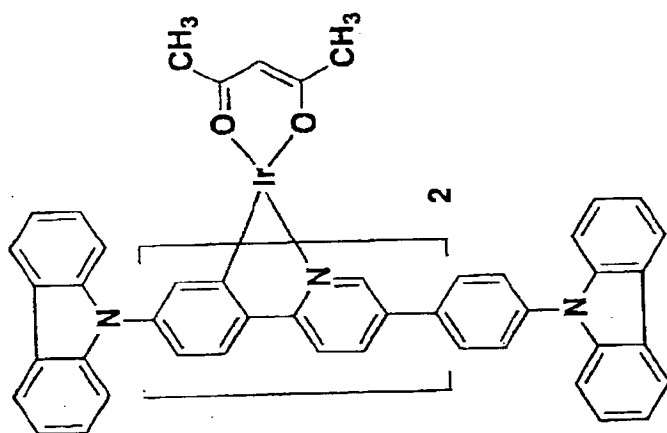
40



10



20

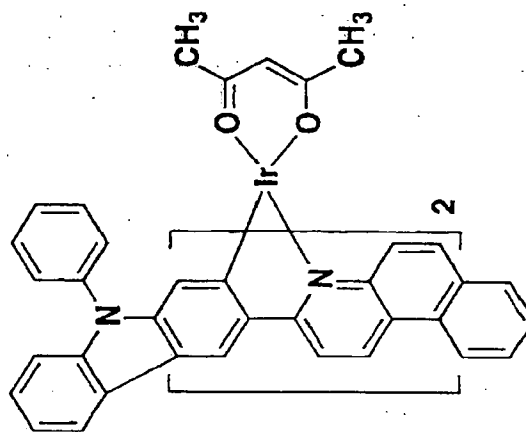


30

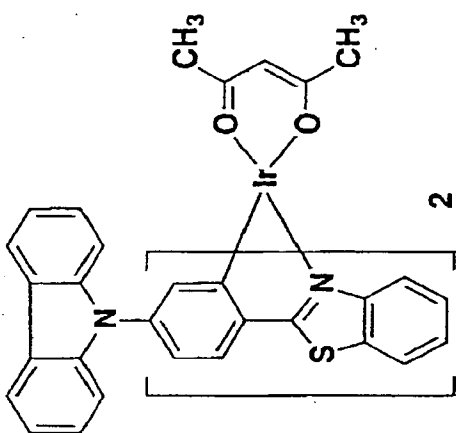
40

【 0 0 9 2 】

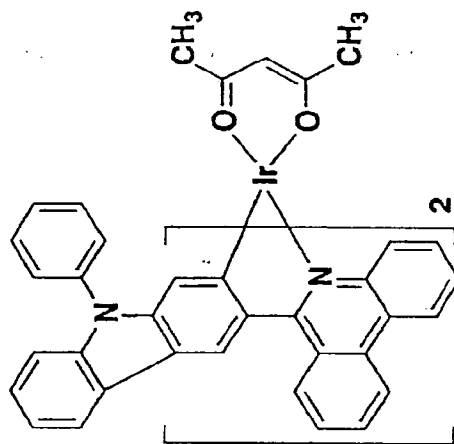
【 化 5 2 】



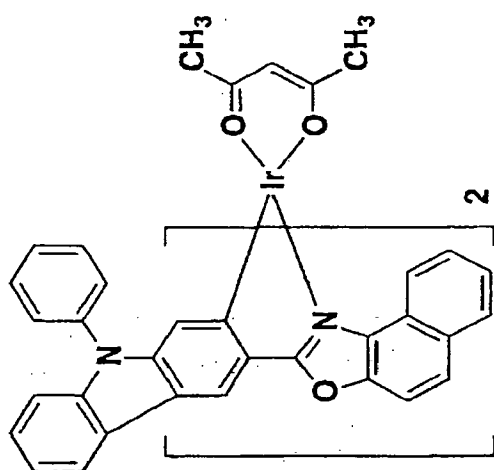
10



20



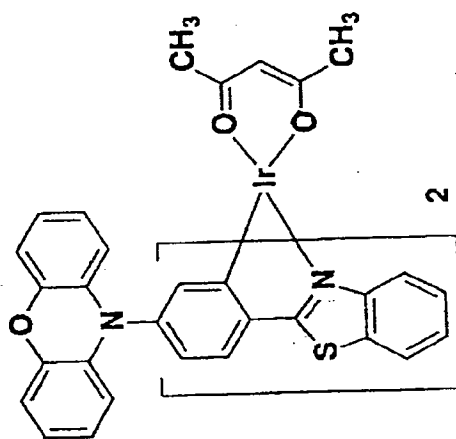
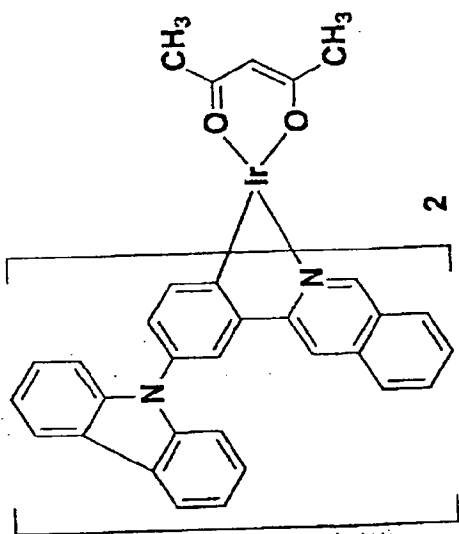
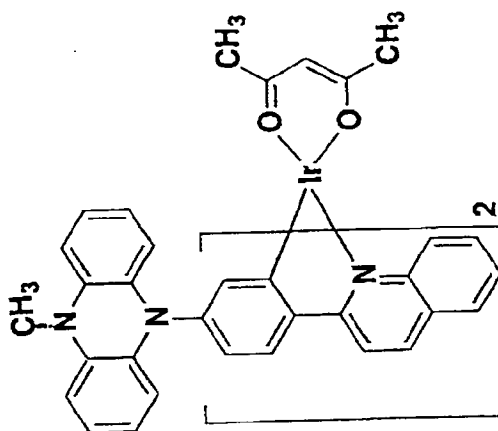
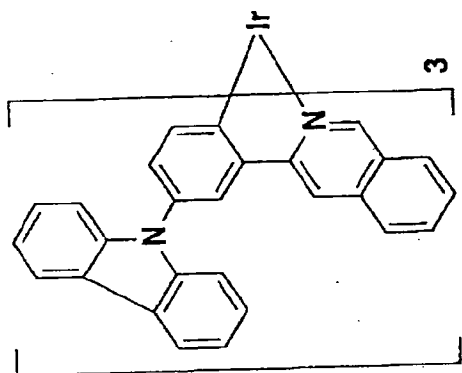
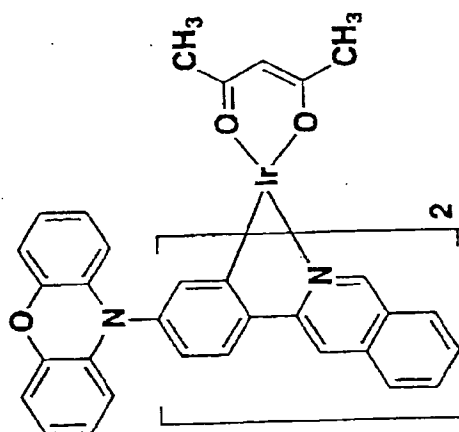
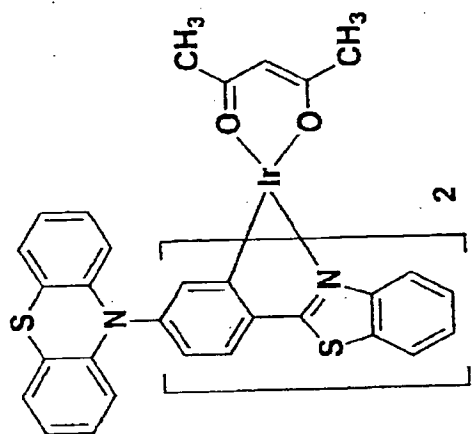
30



40

【 0 0 9 3 】

【 化 5 3 】



【 0 0 9 4 】

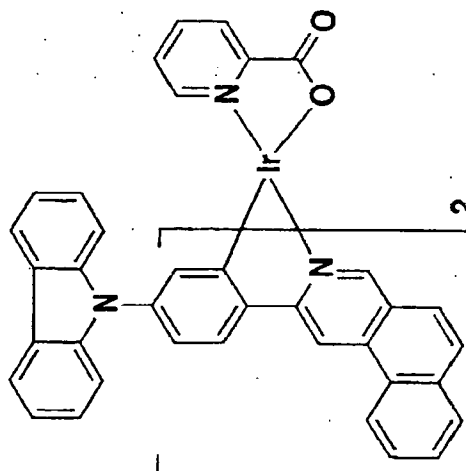
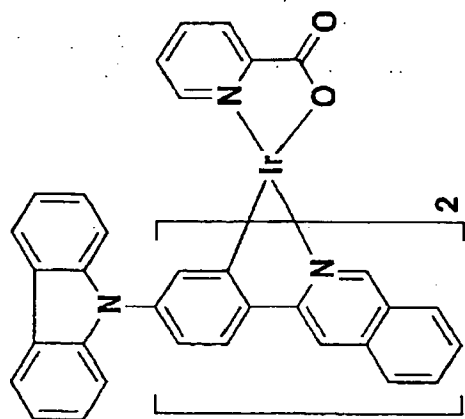
【 化 5 4 】

10 •

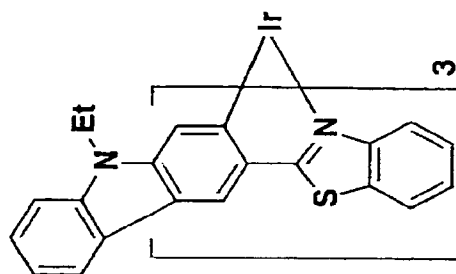
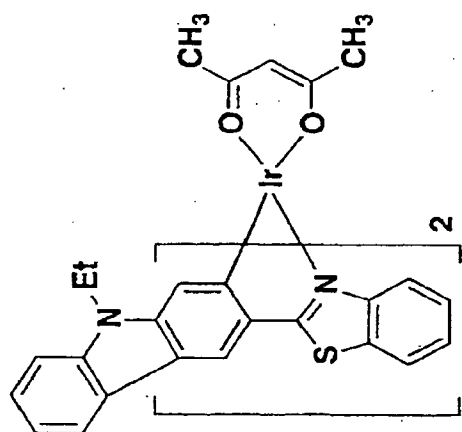
20

30

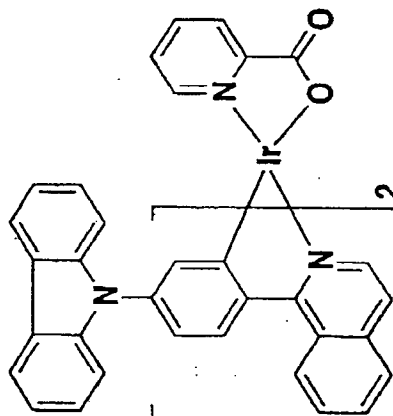
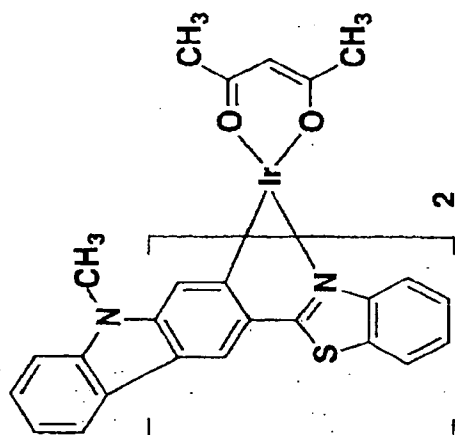
40



10



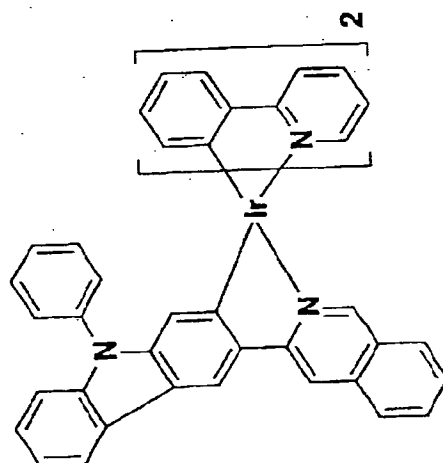
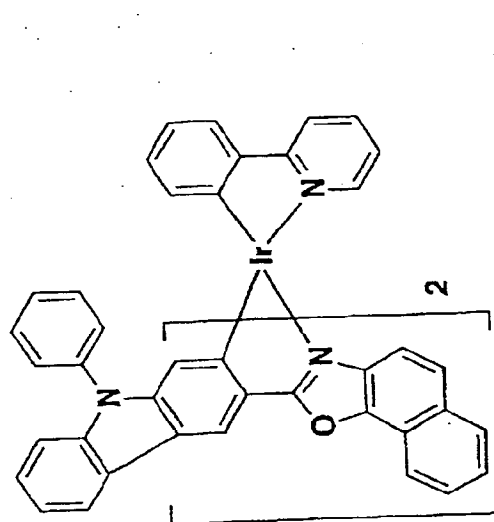
20



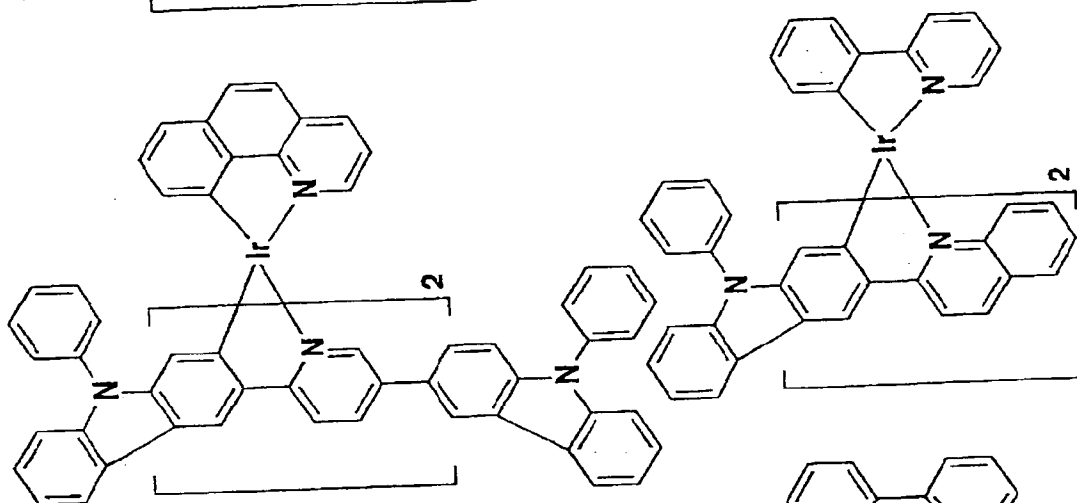
30

40

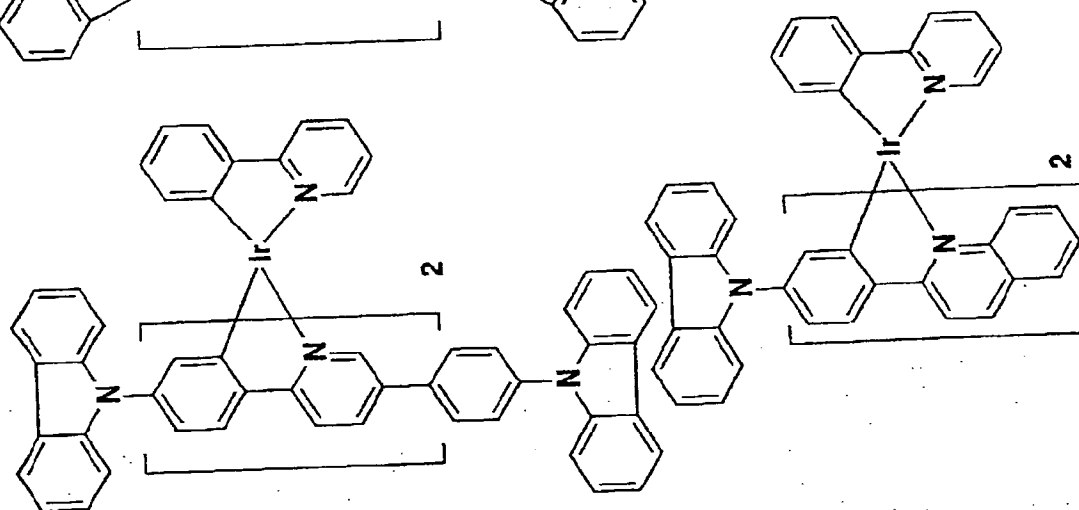
【 0 0 9 5 】
【 化 5 5 】



10



20

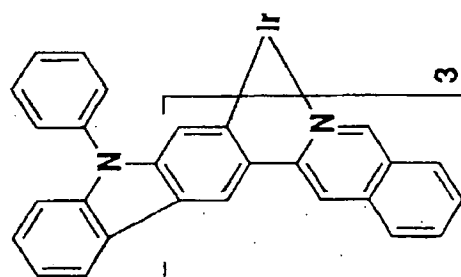
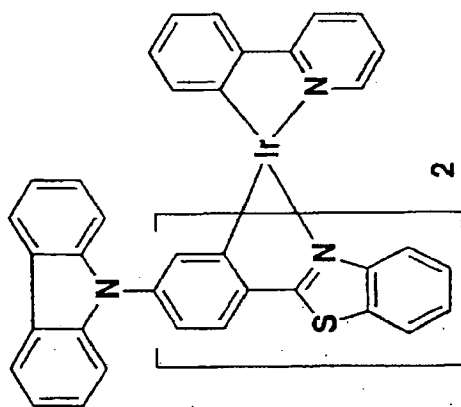
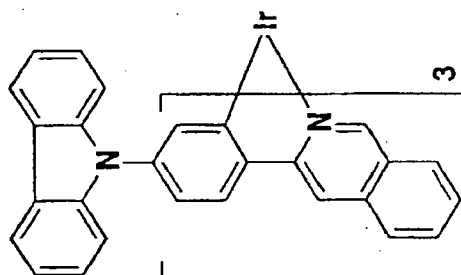
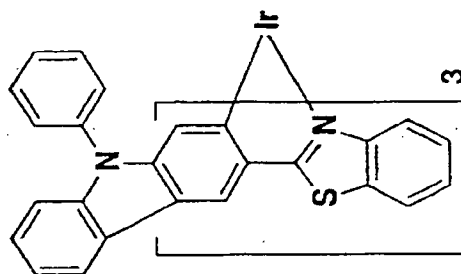
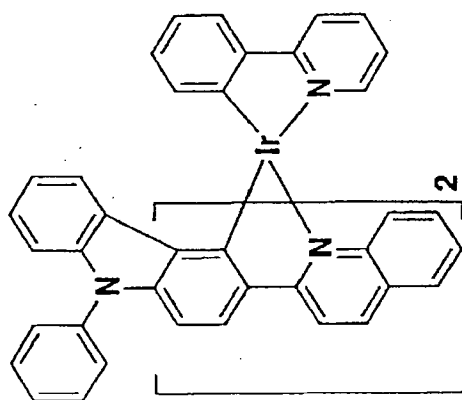
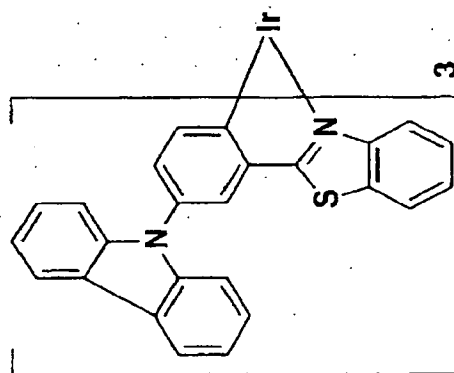
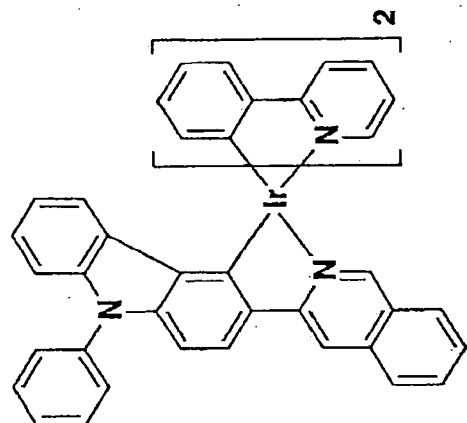


30

40

【0096】

【化56】



10

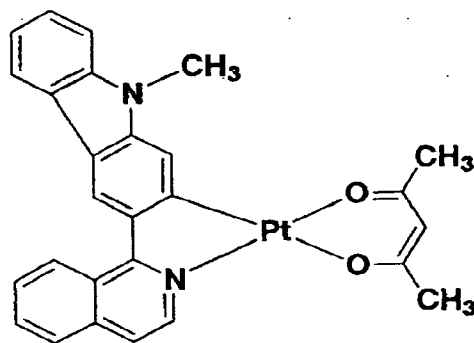
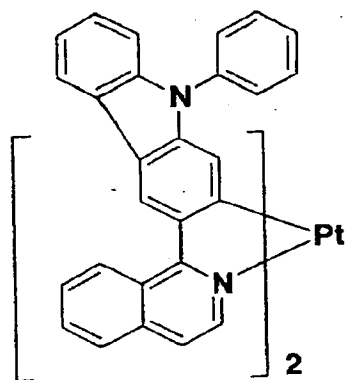
20

30

40

【 0 0 9 7 】

【 化 5 7 】



10

【0098】

以上の例はいずれも、1化合物中に、アリールアミノ基を有する置換基を1種類のみ有する錯体化合物であるが、本発明の錯体化合物は、1化合物中に複数種のアリールアミノ基含有配位子を有していても良い。

【0099】

前記一般式(1)で表される有機金属錯体は、通常、分子量2000以下、好ましくは1500以下である。また該化合物における各配位子の分子量は800以下程度である。

【0100】

前記一般式(1)で表される有機金属錯体は、例えば以下の方法で製造することができる。

20

まず、同一の2座配位子のみを有する錯体の場合、該当2座配位子と、中心金属となるイリジウム等の化合物を、無溶媒もしくはプロトン性溶媒中で加熱することにより得ることが出来る。必要に応じ、触媒としてトリフロロ酢酸銀等を用いても良い。

一分子中に複数種の配位子を有する混合配位子錯体の場合は、まず1種類の二座配位子と、中心金属となるイリジウム等の化合物とを、プロトン性溶媒もしくは非プロトン性溶媒中で反応させ、相当する2核錯体を合成する。これに、溶媒中、塩基の存在下で、他の2座配位子を反応させることにより、目的の錯体が製造できる。また、後で加える「他の2座配位子」の代わりに、該配位子を有するアルカリ金属錯体、もしくはアルカリ土類金属錯体を用いた場合には、塩基非存在下、プロトン性溶媒もしくは非プロトン性溶媒中で反応を行っても良い。

30

【0101】

前記一般式(1)で表される本発明の有機金属錯体は、比較的長波長の発光を示す、有機電界発光素子用燐光色素を得るには、特に効果的である。具体的には、最大発光波長500nm以上、特に最大発光波550nm以上であり、かつ発光効率が高く駆動電圧の低い素子を形成しうる燐光材料を、好適に得ることができる。なお、本発明における錯体化合物の「最大発光波長」とは、発光層に該化合物を含む有機電界発光素子における、該化合物の最大発光波長を意味する。

【0102】

このような最大発光波長を示す化合物を得るには、例えば、一般式(1)において、環a、環b、またはAr^a~Ar^dに対し、これらの環に対する共鳴効果もしくは電子供与性効果の大きい置換基を導入すること、あるいは環a、環b、またはAr^a~Ar^dを、2以上の環が縮合してなる縮合環とすること等、幾つかの方法がある。

40

【0103】

具体的には、例えば、

▲1▼環a、環b、およびAr^a~Ar^dのうち少なくとも1つに、芳香族炭化水素基、芳香族複素環基、アルケニル基またはアルキニル基などの、共鳴効果を奏する基を導入する。

▲2▼環a、環b、およびAr^a~Ar^dのうち少なくとも1つに、アルキル基、アルコ

50

キシル基、またはアミノ基などの電子供与性基を導入する。

▲3▼連結基 Z^a および/または Z^b として、▲1▼で挙げた基から水素原子を1個または2個除去して得られる連結基、または▲2▼で挙げた基から水素原子を1個または2個除去して得られる連結基を導入する。或いは、両者を結合してなる連結基を使用する。

▲4▼環a、環b、および $Ar^a \sim Ar^d$ のうち少なくとも1つを、2以上の環が縮合してなる縮合環とする。

などの手段が挙げられ、これらのうち1以上を採用することにより、所望の最大発光波長を示す有機金属錯体を得ることができる。

【0104】

また、環a、環b、および $Ar^a \sim Ar^d$ に対する置換基の効果は、該置換基の種類、置換位置、および複数の置換基相互の影響などの相乗効果であり、これらを適宜調整することにより、所望のピーク波長に調整することができる。

【0105】

環a、環b、および $Ar^a \sim Ar^d$ のうち少なくとも1つを、2以上の環が縮合してなる縮合環とすることにより、本願化合物の発光ピークを長波長化することができるが、中でも環aまたは環bを縮合環とすることが効果的である。

【0106】

本発明の錯体化合物は、上記▲1▼～▲4▼、置換基の結合位置、およびその相互作用などを勘案し、所望の発光極大波長を有するよう調製することができる。

【0107】

本発明の有機電界発光素子は、基板上に陽極、発光層、および陰極が順次積層されてなり、該発光層が前記一般式(1)で表される本発明の有機金属錯体を含有することを特徴とする。一般式(1)で表される有機金属錯体は、正孔注入・輸送性または電子注入・輸送性を有するホスト化合物にドーブされて、発光層中に含有されることが好ましい。

【0108】

以下、本発明に好適なホスト化合物について説明する。

【0109】

このホスト化合物は、発光層に含まれる一般式(1)で表される有機金属錯体の励起三重項準位より高いエネルギー状態の励起三重項準位を有することが好ましい。また、安定な薄膜形状を与え、高いガラス転移温度(T_g)を有し、正孔および/または電子を効率良く輸送することができる化合物であることが必要である。

【0110】

さらに、電気化学的かつ化学的に安定であり、トラップとなったり発光を消光したりする不純物が製造時或使用時に発生しにくい化合物であることが要求される。

【0111】

これらの条件を満たすホスト材料としては、例えば下記一般式(I)または(I I)で表わされる化合物、もしくは下記一般式(I I I)で表わされる基を有する化合物が挙げられる。

【0112】

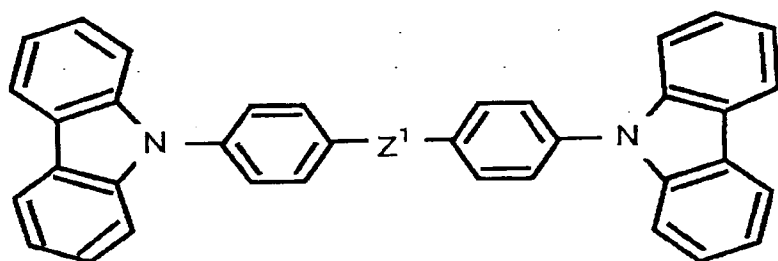
【化58】

10

20

30

40



(I)

10

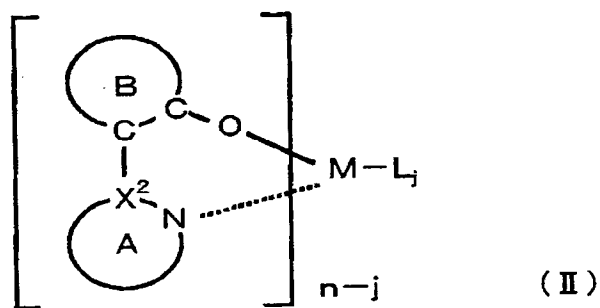
【0113】

(I) 式中、カルbazolリル基およびフェニレン基は任意の置換基を有していても良い。
 Z^1 は直接結合または2価の連結基を示す。

【0114】

【化59】

20



(II)

30

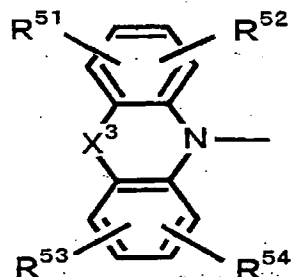
【0115】

(II) 式中、Mは周期律表1族、2族、3族、12族、または13族から選ばれる金属を表し、nは該金属の価数を表わす。Lは任意の置換基を表し、jは置換基Lの数を表し0または1である。X²は炭素原子または窒素原子を表わす。環Aは含窒素複素環を示し、置換基を有していても良い。環Bは芳香族炭化水素環または芳香族複素環を示し、置換基を有していても良い。

【0116】

【化60】

40



(III)

【0117】

50

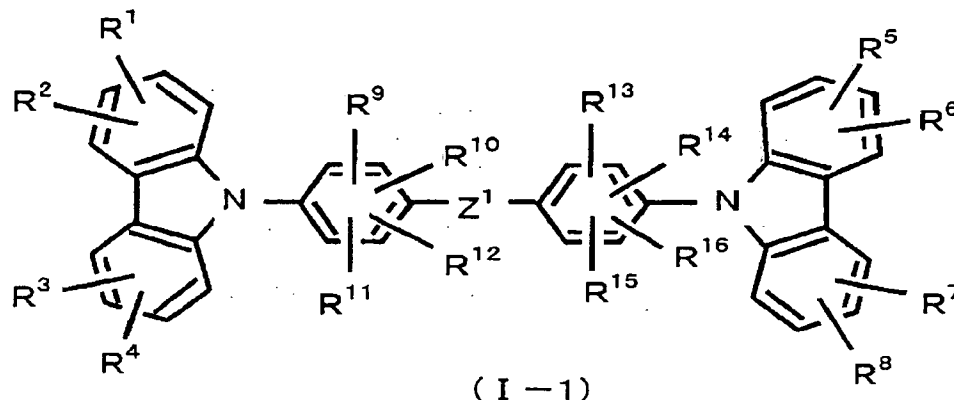
((I I I) 式中、 $R^{5.1} \sim R^{5.4}$ は各々独立に、水素原子または任意の置換基を表し、 $R^{5.1}$ と $R^{5.2}$ 、 $R^{5.3}$ と $R^{5.4}$ はそれぞれ結合して環を形成していても良い。 X^3 は酸素原子または硫黄原子を示す。)

【0118】

前記一般式 (I) で表わされる N-フェニルカルバゾール骨格を有する化合物として、好ましくは下記一般式 (I-1) で表わされる化合物が挙げられる。

【0119】

【化61】



【0120】

((I - 1) 式中、 $R^1 \sim R^{16}$ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アラルキルアミノ基、ハロアルキル基、水酸基、アリールオキシ基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表し、 R^1 と R^2 、 R^3 と R^4 、 R^5 と R^6 、 R^7 と R^8 、 R^9 と R^{10} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{15} と R^{16} はそれぞれ互いに結合して環を形成していても良い。 Z^1 は直接結合または2価の連結基を示す。)

【0121】

(I - 1) 式中の $R^1 \sim R^{16}$ として、具体的には水素原子；塩素原子、フッ素原子などのハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；カルボキシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基などのアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；水酸基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリールオキシ基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基が挙げられる。

【0122】

前記芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基が有し得る置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のアルキルアミノ基；アセチル基等のアシル基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；シアノ基などが挙げられる。

なお、上述の各置換基に含まれるアルキル鎖部分は、いずれも直鎖であっても分岐してい

ても良い。以下の置換基の例示においても同様である。

【0123】

また、 R^1 と R^2 、 R^3 と R^4 、 R^5 と R^6 、 R^7 と R^8 、 R^9 と R^{10} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{15} と R^{16} はそれぞれ隣接する置換基同士で結合し、ベンゼン環、シクロヘキサン環等の5～7員環を形成していても良い。

【0124】

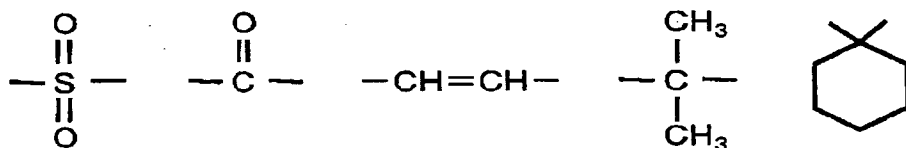
R^1 ないし R^{16} として特に好ましいのは、水素原子、アルキル基、またはシアノ基である。

【0125】

一般式 (I) または (I-1) における Z^1 として、好ましくは直接結合、酸素原子、硫黄原子、以下に示す連結基、

【0126】

【化62】



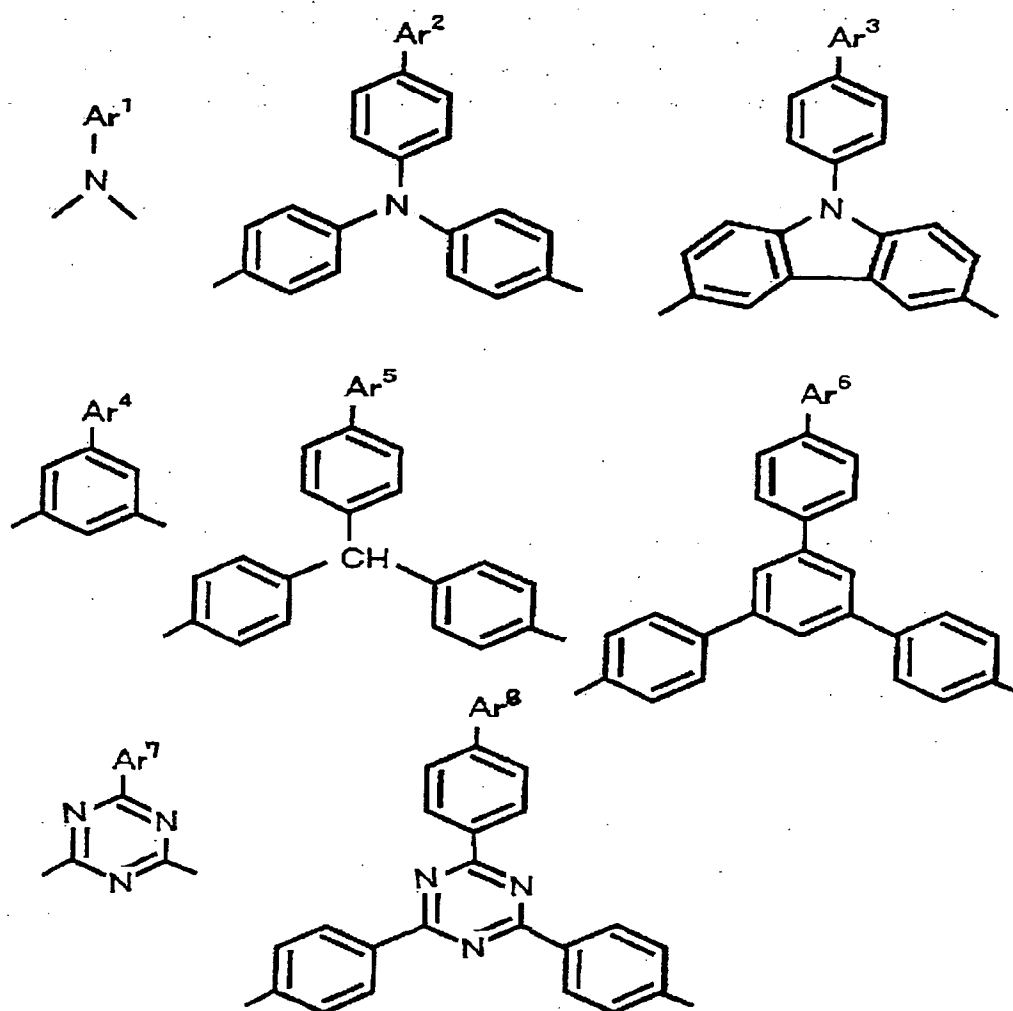
10

20

置換基を有していても良い2価の芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基、または、以下の連結基のいずれかが挙げられる。

【0127】

【化63】



10

20

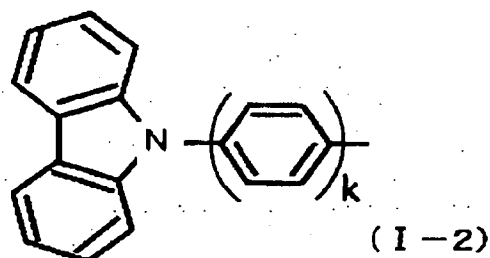
【0128】

(上記構造中のベンゼン環部分は、いずれも任意の置換基を有して良く、また Ar^1 ~ Ar^6 は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基、または以下の一般式 (I-2) で表される基が挙げられる。

30

【0129】

【化64】



40

$k = 0$ または 1 である。なお、式 (I-2) 中におけるカルバゾリル基およびフェニレン基は、任意の置換基を有していても良い。)

【0130】

一般式 (I) または (I-1) における Z^1 の好ましい連結基のうち、芳香族炭化水素環基としては、フェニレン基、ナフチレン基、アントラニル基、ナфтаセン基等の、5 ~ 6 員環の単環または 2 ~ 4 縮合環が挙げられ、芳香族複素環基としては、2 価のチオフェン

50

環残基、フラン環残基、ピリジン環残基、ピリミジン環残基またはキノリン環残基等の、5～6員環の単環または2～3縮合環が挙げられる。

【0131】

これらの芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基は、メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基、フッ素原子等のハロゲン原子、トリフルオロメチル基等の α -ハロアルキル基等の置換基を有しても良い。

【0132】

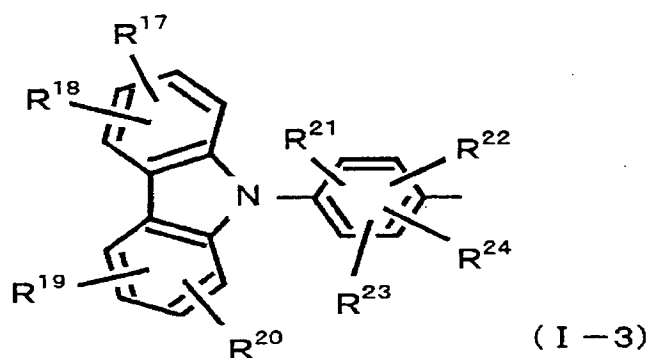
また、 $Ar^1 \sim Ar^6$ としては、フェニル基、ナフチル基、アントラニル基、ナфтаセニル基等の、5～6員環の単環または2～4縮合環である芳香族炭化水素環基、またはチエニル基、フリル基、ピリジル基、ピリミジニル基、キノリル基等の、5～6員環の単環または2～3縮合環である芳香族複素環基が挙げられる。これらの芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基は、メチル基、エチル基等のアルキル基、フッ素原子等のハロゲン原子、トリフルオロメチル基等の α -ハロアルキル基等の置換基を有しても良い。

【0133】

前記式(I-2)で表わされる構造は、好ましくは下記式(I-3)で表わされる。

【0134】

【化65】



【0135】

((I-3)式中、 $R^{17} \sim R^{24}$ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、置換基を有していても良いアミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシ基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アラルキルアミノ基、ハロアルキル基、水酸基、アリアルオキシ基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表し、 R^{17} と R^{18} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{23} と R^{24} はそれぞれ互いに結合して環を形成していても良い。)

【0136】

上記(I-3)式において、 $R^{17} \sim R^{24}$ として、具体的には、水素原子；ハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；カルボキシ基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基などのアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；水酸基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリアルオキシ基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基が挙げられる。

【0137】

前記芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基が有し得る置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等の炭素

数 2 ～ 6 のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数 2 ～ 6 のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数 1 ～ 6 のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；シアノ基などが挙げられる。

【 0 1 3 8 】

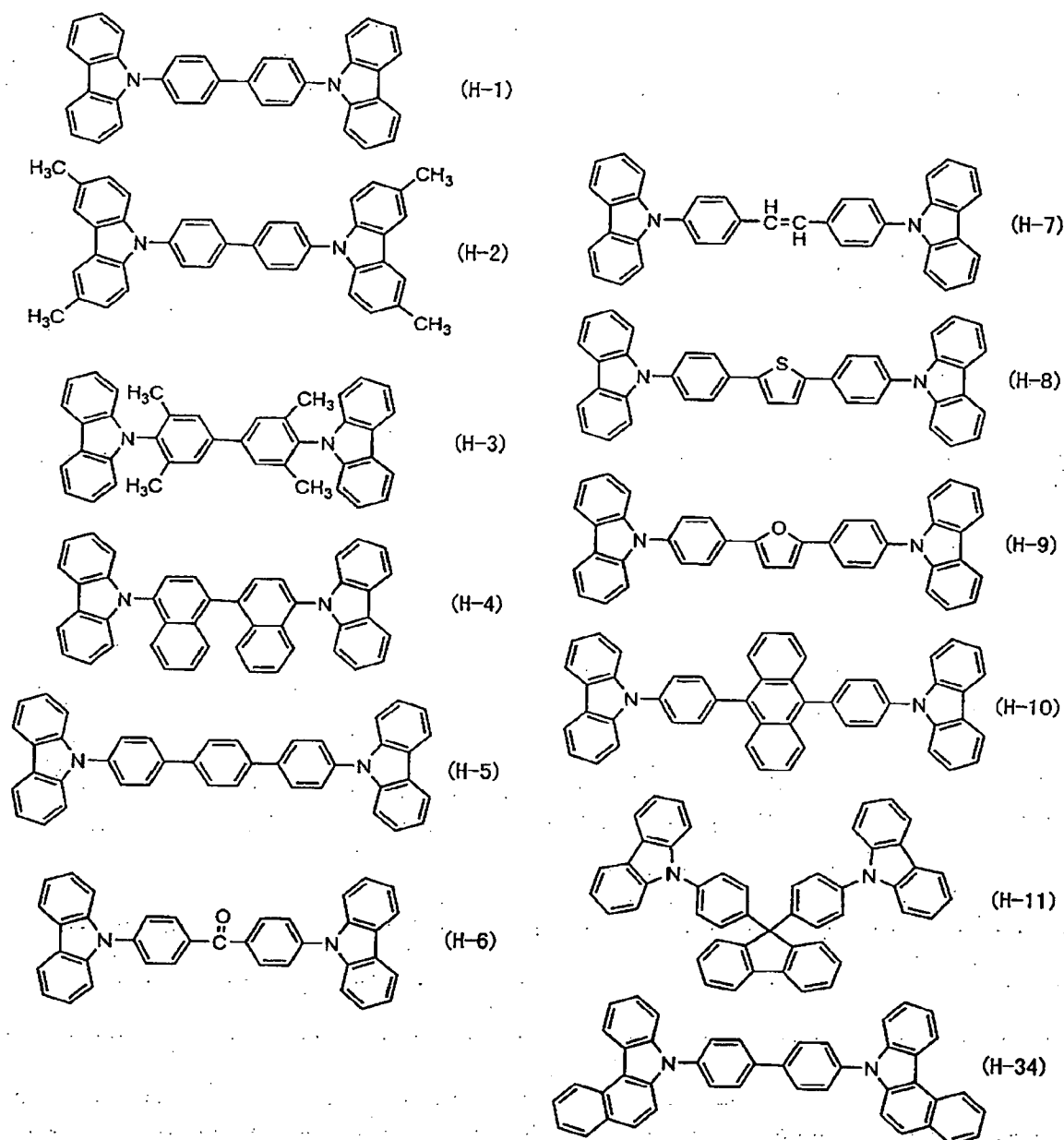
なお R^{17} と R^{18} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{23} と R^{24} はそれぞれ隣接する置換基同士で結合し、ベンゼン環やシクロヘキサン環などの 5 ～ 7 員環を形成していても良い。

【 0 1 3 9 】

前記一般式 (1) で表わされる化合物の好ましい具体例を以下に示すが、これらに限定するものではない。

【 0 1 4 0 】

【 化 6 6 】



【 0 1 4 1 】

10

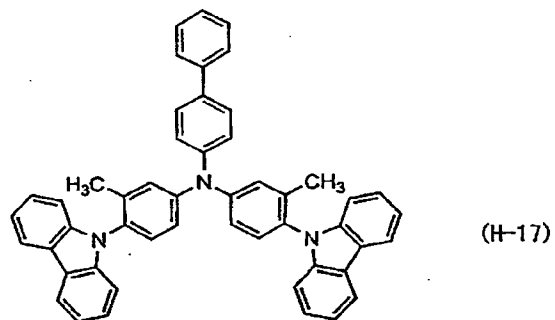
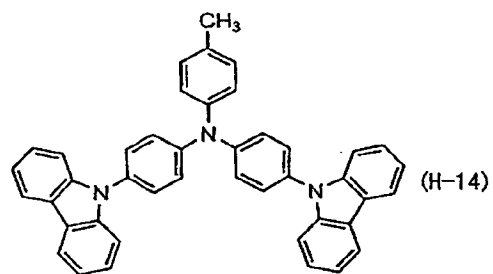
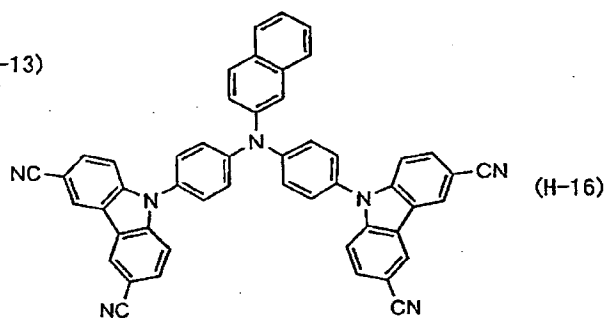
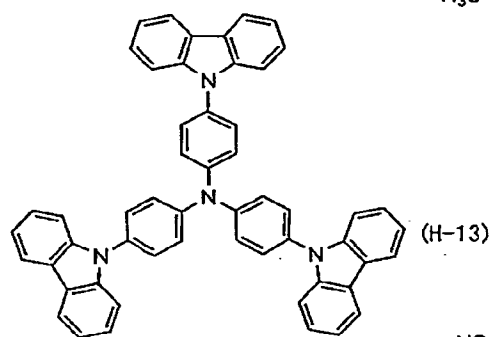
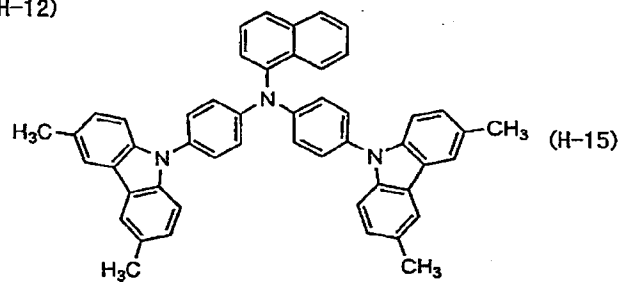
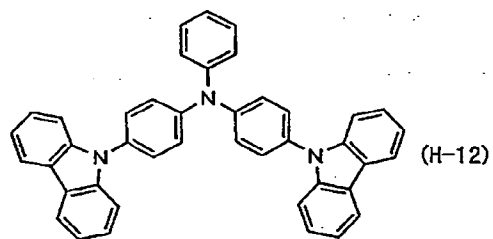
20

30

40

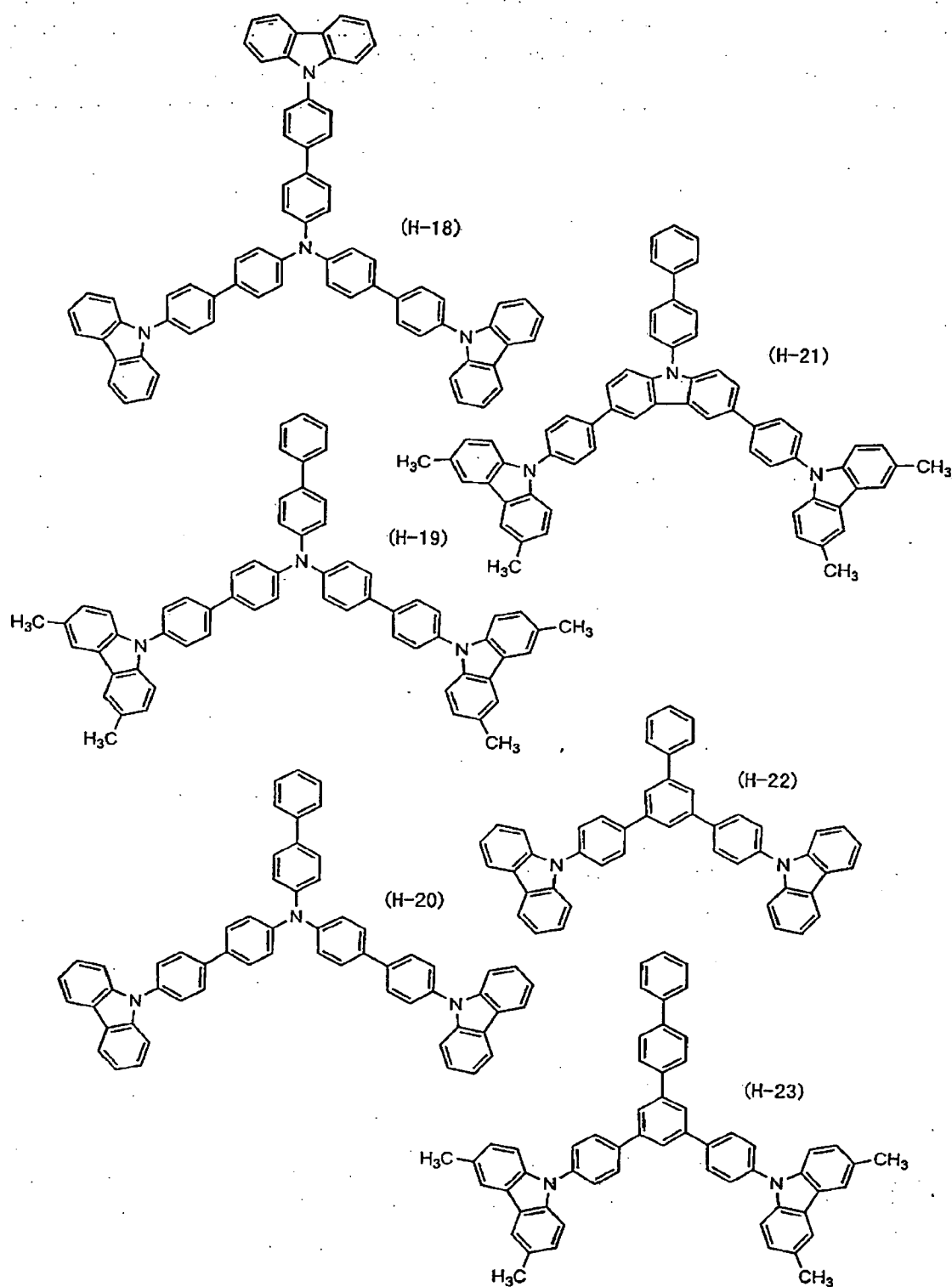
50

【化 6 7】

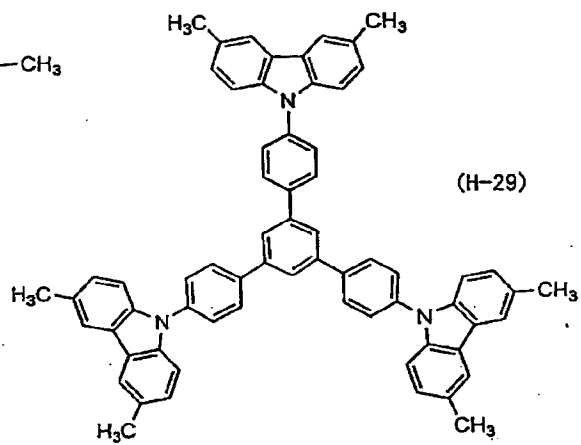
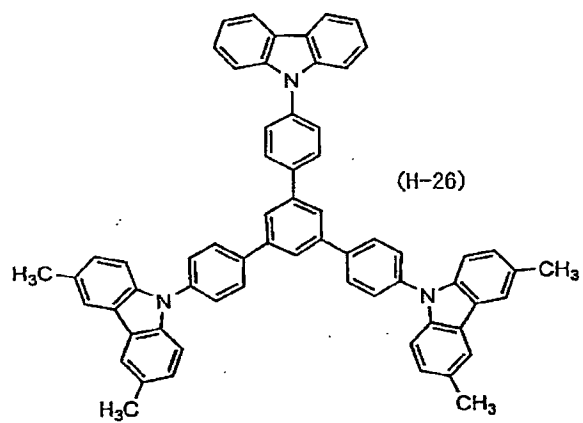
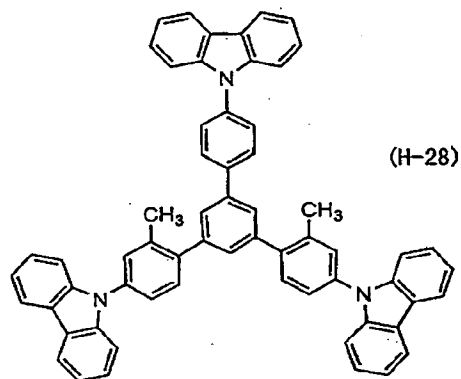
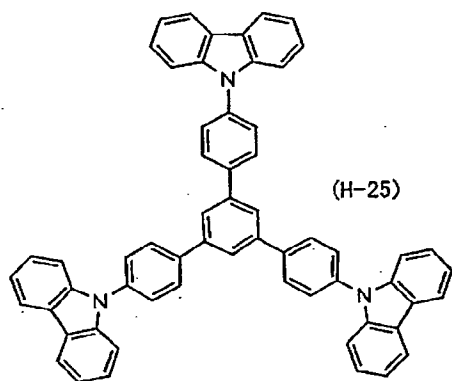
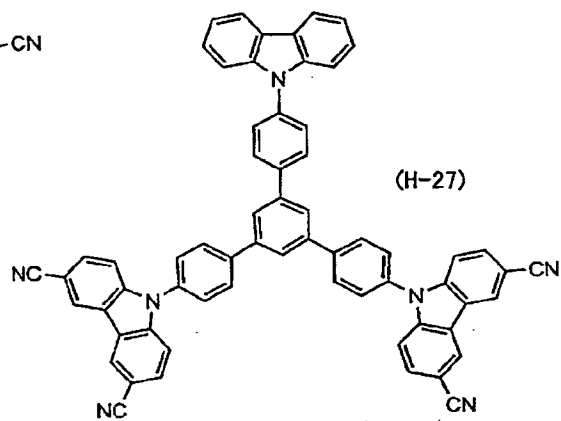
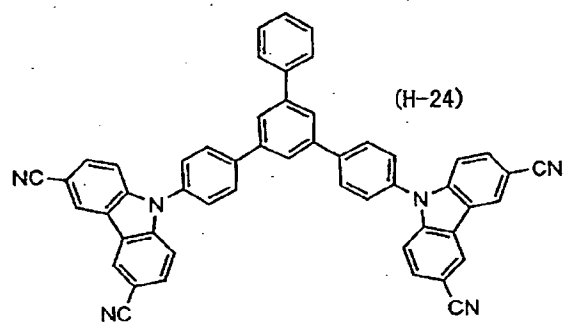


【 0 1 4 2 】

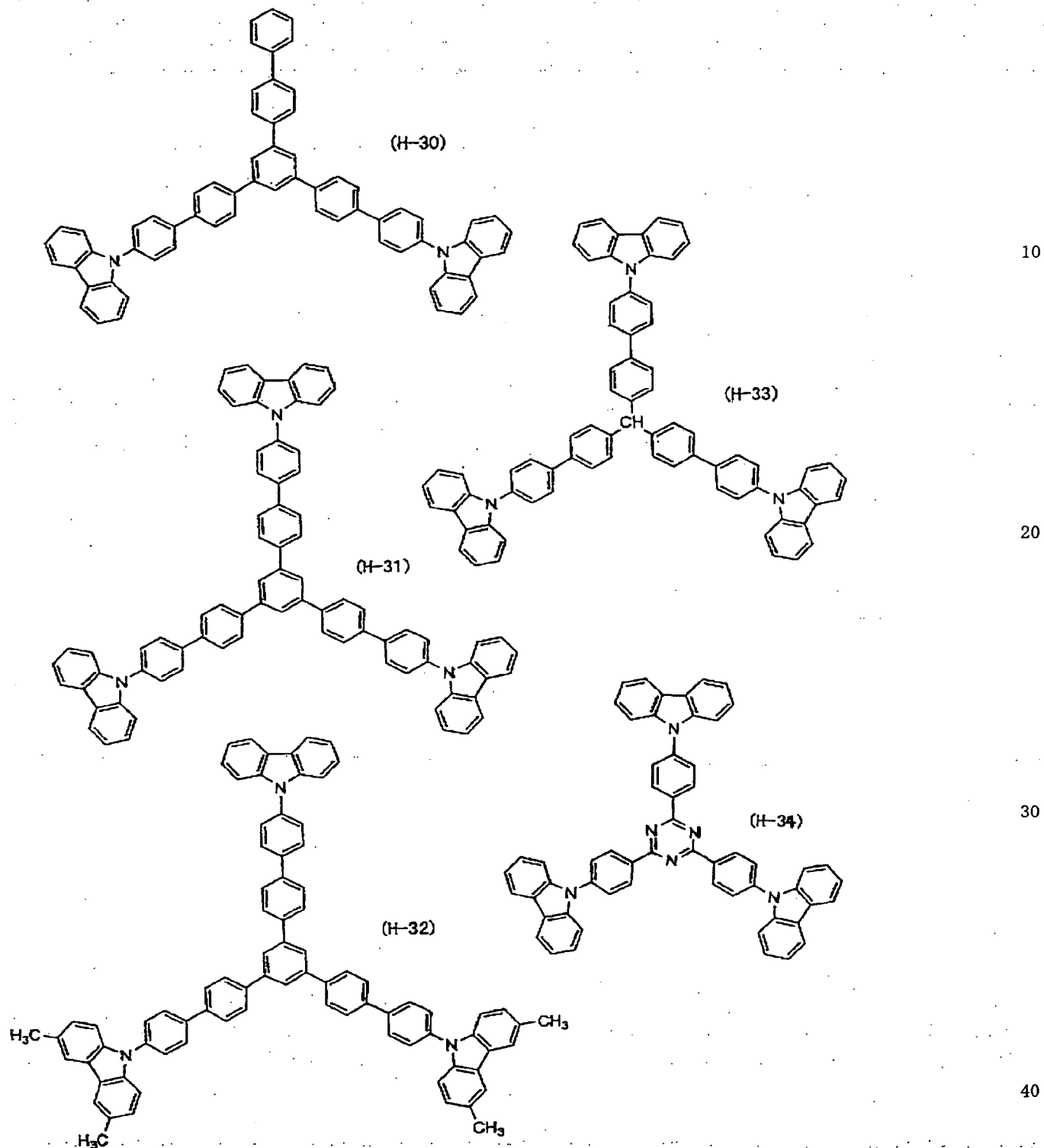
【化 6 8】



【 0 1 4 3 】
【 化 6 9 】



【 0 1 4 4 】
【 化 7 0 】



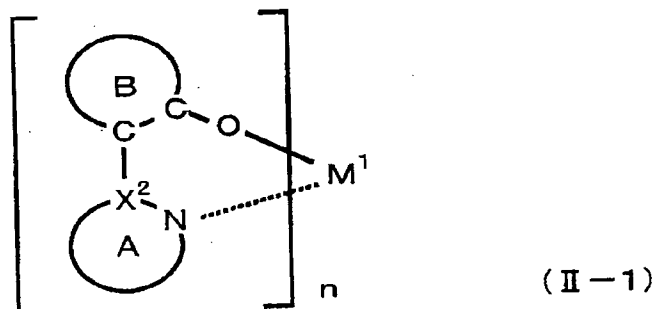
【0145】

本発明の有機電界発光素子は、発光層におけるホスト材料として前記一般式 (I I) で表わされる有機金属錯体化合物を使用しても良い。前記一般式 (I I) で表わされるホスト材料としては、特に下記一般式 (I I-1) で表わされる有機金属錯体や、下記一般式 (I I-2) で表わされる混合配位子錯体、または下記一般式 (I I-3) で表わされる二核金属錯体が好ましい。

【0146】

【化 7 1】

[有機金属錯体]



10

【0147】

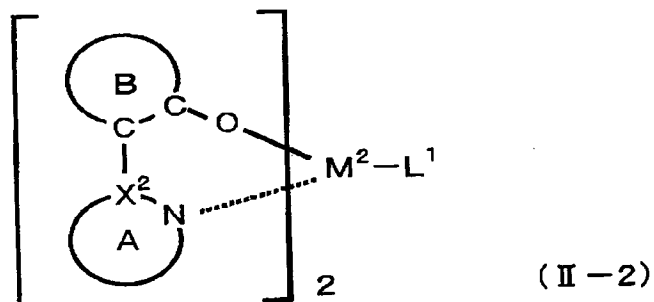
((II-1) 式中、 M^1 は 1 ないし 3 価の金属を表し、 n 、 X^2 、環 A および環 B は一般式 (I I) におけると同義である。)

【0148】

20

【化 7 2】

[混合配位子錯体]



30

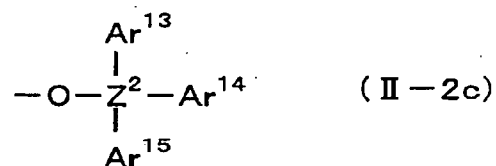
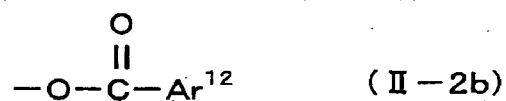
【0149】

((II-2) 式中、 M^2 は 3 価の金属を表し、 X^2 、環 A および環 B は一般式 (I I) におけると同義である。 L^1 は下記一般式 (I I-2 a)、(I I-2 b) または (I I-2 c) を表わす。)

【0150】

40

【化 7 3】



10

【0151】

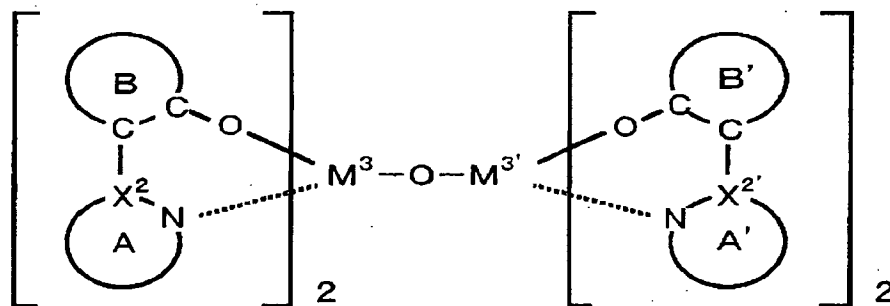
((II-2a)、(II-2b)、(II-2c)式中、 $\text{Ar}^{11} \sim \text{Ar}^{15}$ は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または置換基を有していても良い芳香族複素環基を表し、 Z^2 はシリコンまたはゲルマニウムを表わす。)

【0152】

【化74】

20

[2核金属錯体]



(II-3)

30

【0153】

((II-3)式中、 M^3 および $\text{M}^{3'}$ は3価の金属を表し、 X^2 、環A及び環Bは一般式(I I)におけると同義であり、 $\text{X}^{2'}$ は X^2 と、環 A' は環Aと、また環 B' は環Bとそれぞれ同義である。)

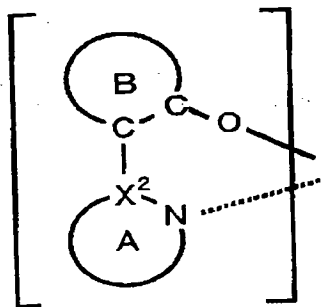
【0154】

なお、一般式(I I)および(I I-1)～(I I-3)で表わされる化合物1分子中に含まれる、複数の下記構造部分

【0155】

【化75】

40

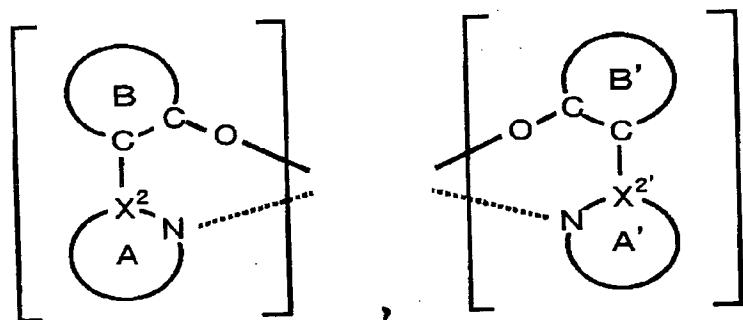


10

(一般式 (I I-3) においては、1 化合物中に 2 個ずつ存在する下記構造部分

【0156】

【化76】



20

)、即ち環 A、環 B、および X^2 (式 (I I-3) の場合は、環 A、環 A'、環 B、環 B'、 X^2 および $X^{2'}$) は、同じであっても良いし、異なっても良い。合成が容易である点からは、すべて同じであることが好ましい。

【0157】

同様に、一般式 (I I-3) で表わされる化合物における M^3 および $M^{3'}$ も、同じであっても異なっても良く、合成が容易である点からは、同じであることが好ましい。

30

【0158】

前記一般式 (I I) および (I I-1) ~ (I I-3) で表わされる化合物の環 A、環 A'、環 B、および環 B' は、それぞれ下記のものから選ばれるものが好ましい。

〔環 A および環 A'〕置換基を有していても良い 5 員環または 6 員環の含窒素芳香族複素環であり、該環に 5 または 6 員環の芳香族炭化水素環または芳香族複素環が 1 または 2 個縮合して縮合環を形成しても良い。

〔環 B および環 B'〕置換基を有していても良い 6 員環の芳香族炭化水素環または芳香族複素環であり、該環に 5 または 6 員環の芳香族炭化水素環または芳香族複素環が 1 または 2 個縮合して縮合環を形成しても良い。

40

【0159】

前記一般式 (I I) および (I I-1) ~ (I I-3) で表わされる化合物の環 A、環 A'、環 B、および環 B' として、より好ましくは各々単環であり、中でもそれぞれ下記から選ばれる環が好ましい。

〔環 A および環 A'〕それぞれ置換基を有していても良い、ジアゾール環、チアゾール環、オキサゾール環、チアジアゾール環、オキサジアゾール環、トリアゾール環、ピリジン環、ジアジン環、トリアジン環

〔環 B および環 B'〕それぞれ置換基を有していても良い、ベンゼン環、ピリジン環、ジアジン環、トリアジン環

【0160】

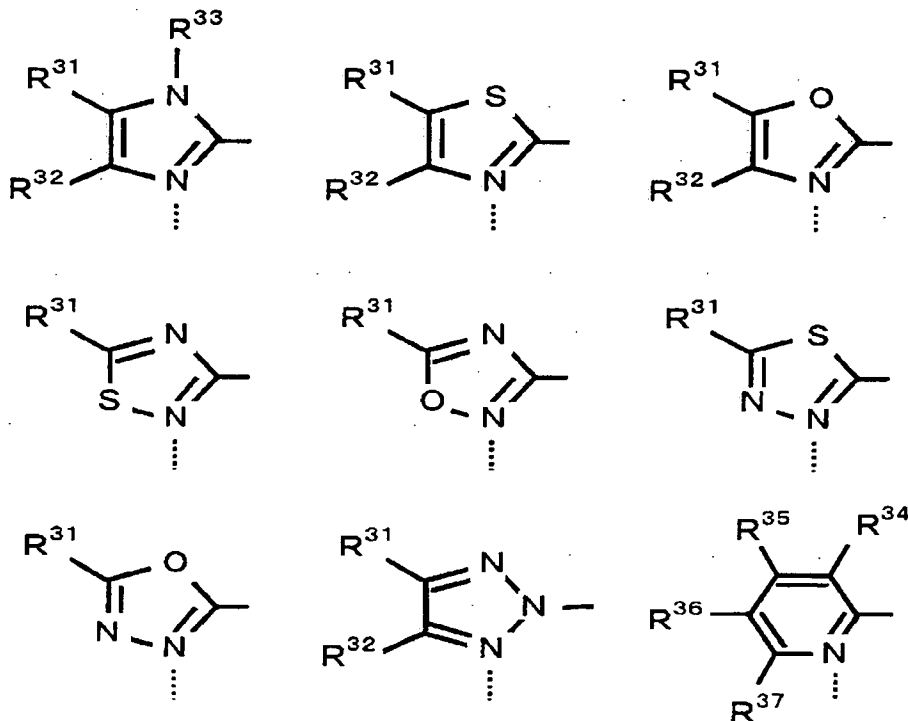
50

さらに前記一般式 (I I) および (I I - 1) ~ (I I - 3) で表わされる化合物の環 A、環 A'、環 B、および環 B' は、それぞれ下記構造式から選ばれることが最も好ましい。

【0161】

【化77】

〔環Aおよび環A'〕



10

20

【0162】

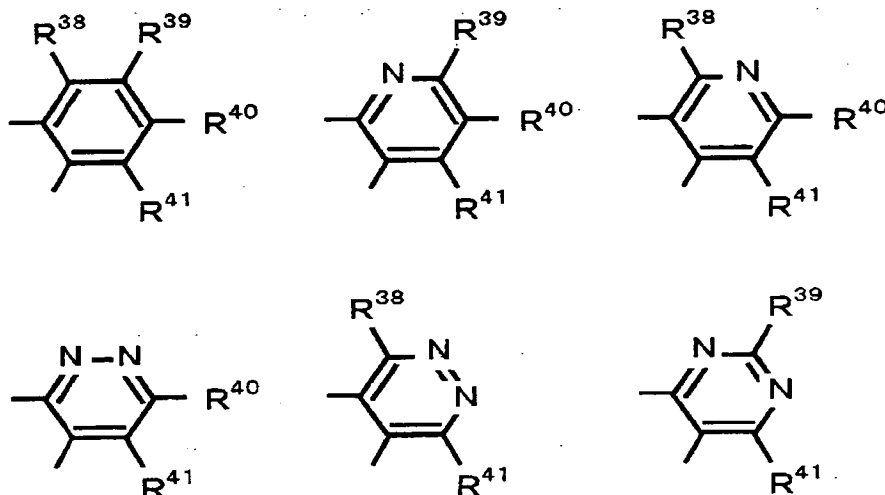
(式中、R³¹ ~ R³⁷ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アラルキルアミノ基、ハロアルキル基、水酸基、アリーロキシ基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または置換基を有していても良い芳香族複素環基を表し、R³¹とR³²、R³¹とR³³、R³⁴とR³⁵、R³⁵とR³⁶、R³⁶とR³⁷はそれぞれ互いに結合して環を形成していても良い。)

30

【0163】

【化78】

[環Bおよび環B']



10

【0164】

(式中、R³⁸ ~ R⁴¹ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アラルキルアミノ基、ハロアルキル基、水酸基、アリーロキシ基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または置換基を有していても良い芳香族複素環基を表し、R³⁸とR³⁹、R³⁹とR⁴⁰、R⁴⁰とR⁴¹はそれぞれ互いに結合して環を形成していても良い。)

20

【0165】

なお上記「環Bおよび環B'」の構造における2本の結合手は、前記式(I I)および(I I-1) ~ (I I-3)における環Bおよび環B'構造の定義を満たす限り、酸素原子、または環Aおよび環A'における原子X²、X^{2'}のうち、いずれがいずれに結合していても良い。

30

【0166】

R³¹ ~ R⁴¹として、具体的には水素原子；ハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1~6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等の炭素数2~6のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；カルボキシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1~6のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2~6のアルコキシカルボニル基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリーロキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基；ジフェネチルアミノ基などのジアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等のα-ハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表す。

40

【0167】

前記芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基が有し得る置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1~6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2~6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2~6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1~6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリーロキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基；アセチル基等のアシル基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；シアノ基などが挙げられる。

50

【0168】

なお、 R^{31} と R^{32} 、 R^{31} と R^{33} 、 R^{34} と R^{35} 、 R^{35} と R^{36} 、 R^{36} と R^{37} 、 R^{38} と R^{39} 、 R^{39} と R^{40} 、 R^{40} と R^{41} がそれぞれ隣接する基同士で結合して形成する環としては、ベンゼン環、またはシクロヘキサン環等が挙げられる。

【0169】

$R^{31} \sim R^{41}$ として好ましくは、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アルコキシ基、ハロアルキル基または置換基を有していても良い芳香族炭化水素基であるか、または隣接する基同士で結合して環を形成する。

【0170】

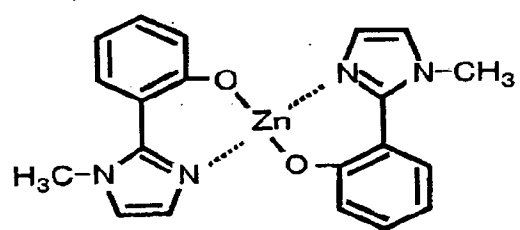
一般式 (I I) および (I I - 1) ~ (I I - 3) で表わされる化合物の金属 M (M^1 、 M^2 、 M^3 および M^3') は、周期律表 1 族、2 族、3 族、12 族、13 族から選ばれる金属であれば特に限定されないが、好ましくは亜鉛、アルミニウム、ガリウム、ベリリウム、およびマグネシウムが挙げられる。 10

【0171】

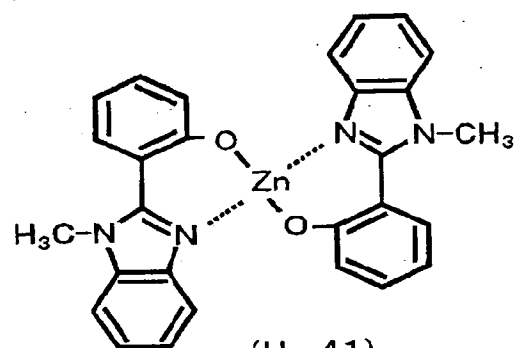
前記一般式 (I I) および (I I - 1) ~ (I I - 3) で表わされる化合物の好ましい具体例を以下に示すが、これらに限定するものではない。

【0172】

【化79】

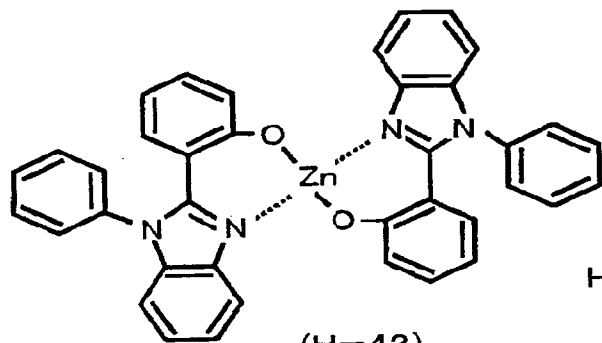


(H-40)

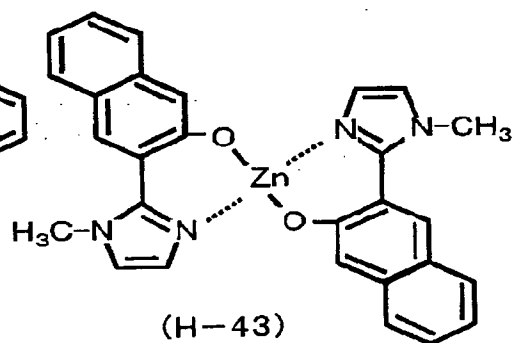


(H-41)

10

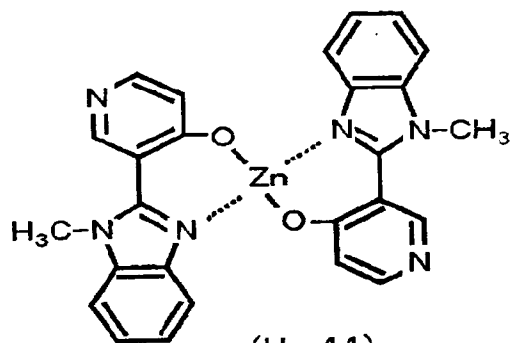


(H-42)

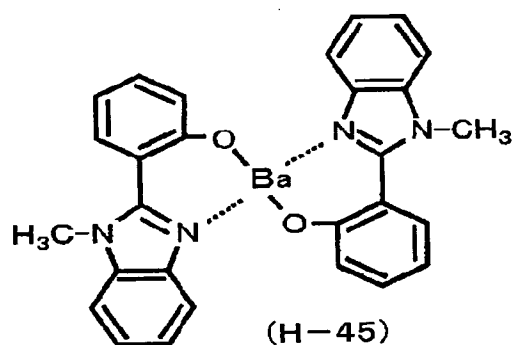


(H-43)

20



(H-44)

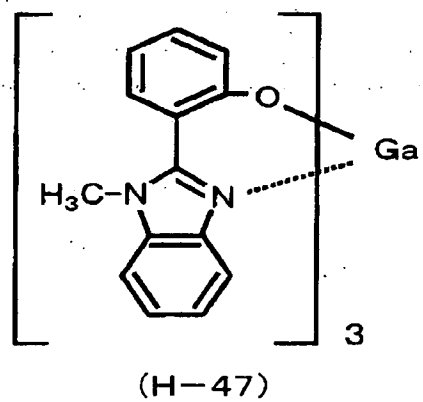
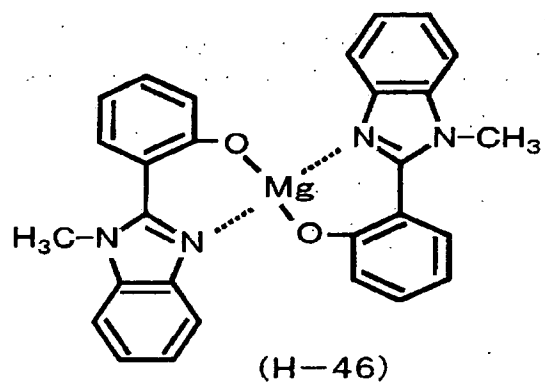


(H-45)

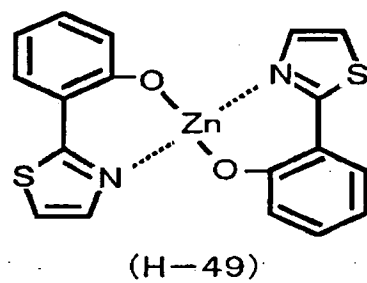
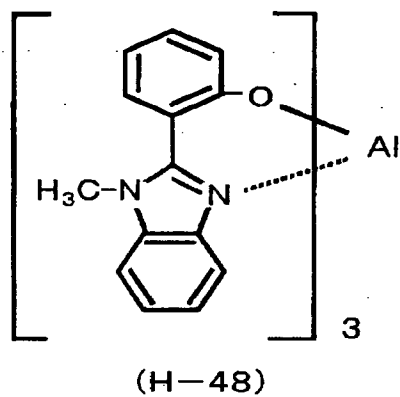
30

【 0 1 7 3 】

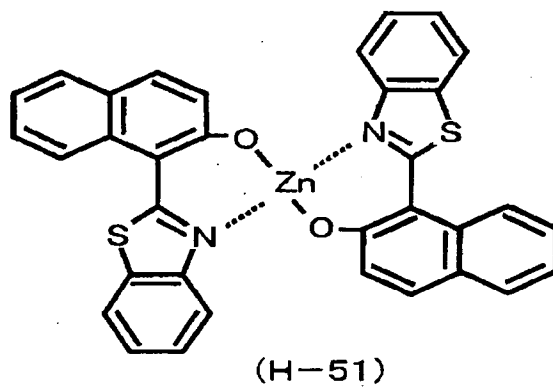
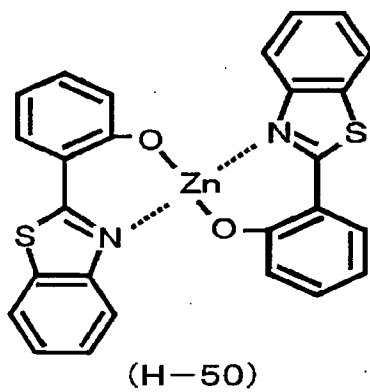
【 化 8 0 】



10



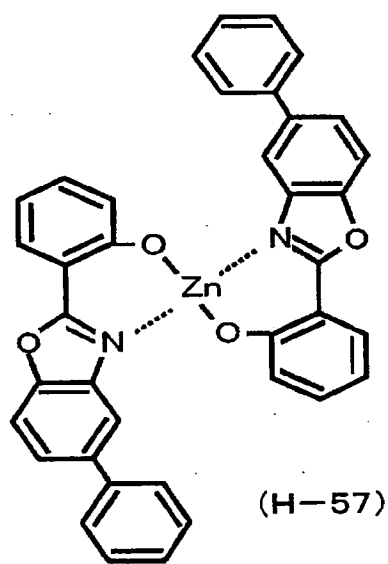
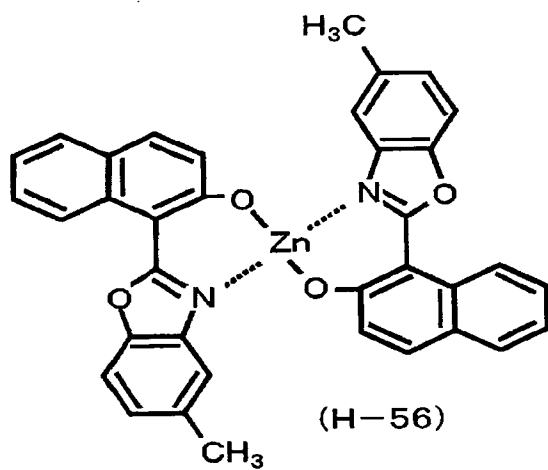
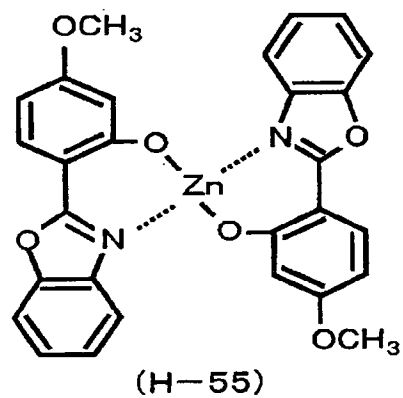
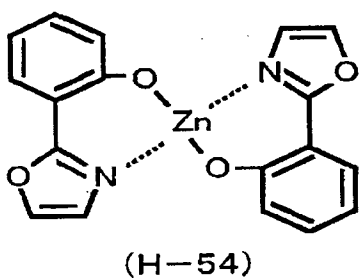
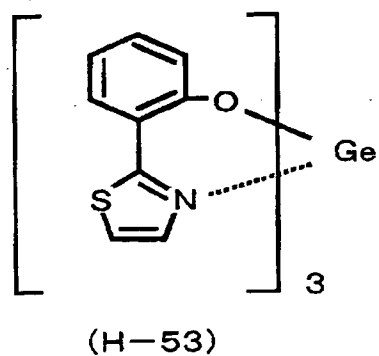
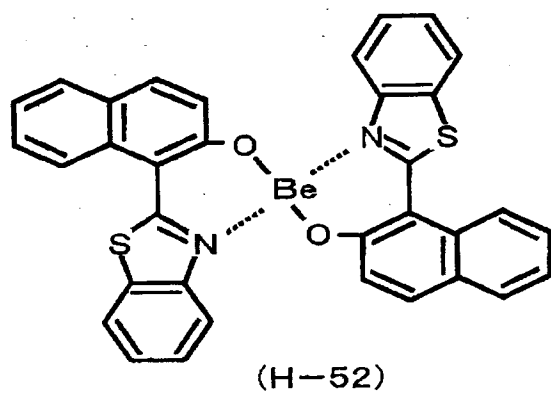
20

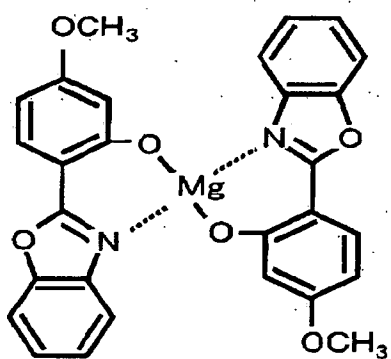


30

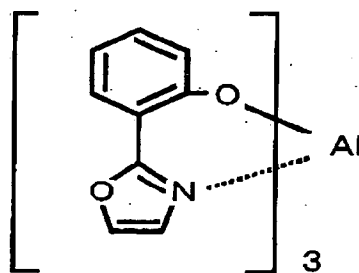
【 0 1 7 4 】
【 化 8 1 】

40



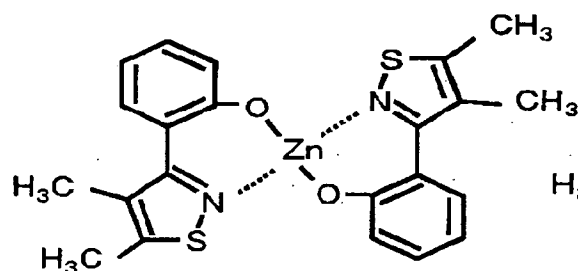


(H-58)

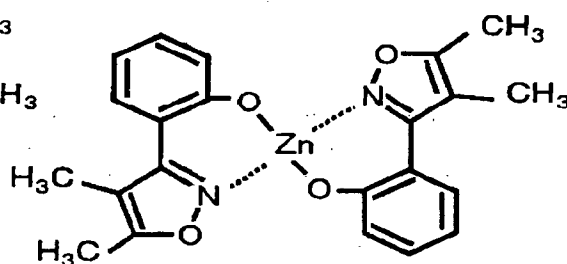


(H-59)

10

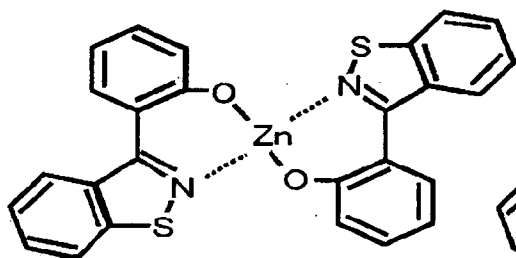


(H-60)

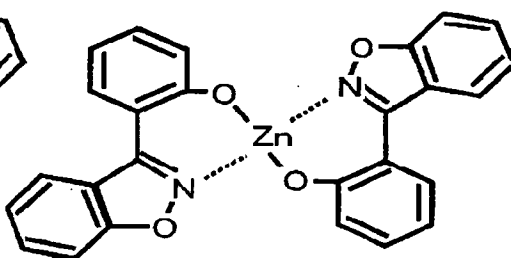


(H-61)

20

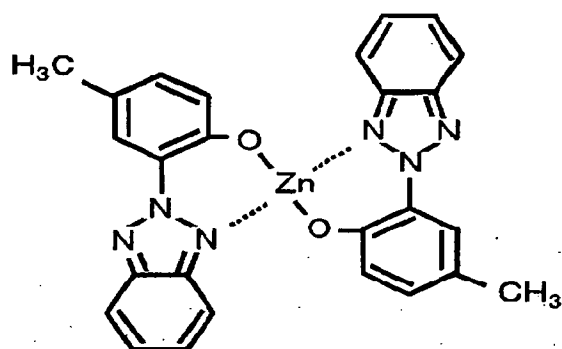


(H-62)

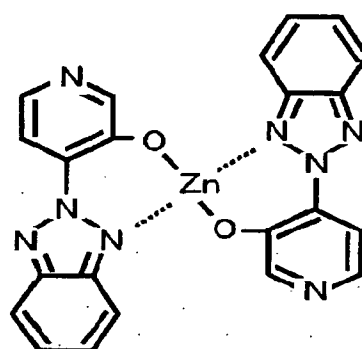


(H-63)

30



(H-64)

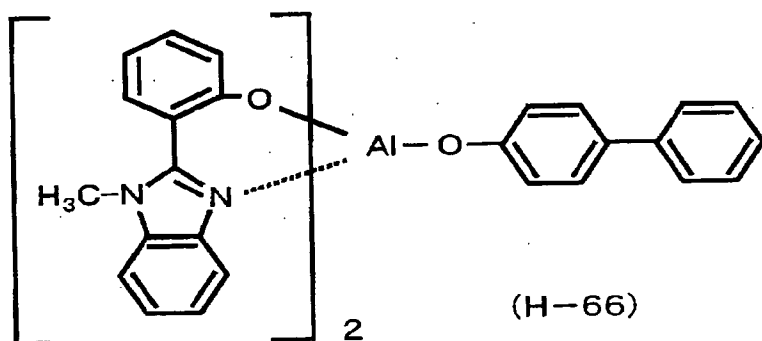


(H-65)

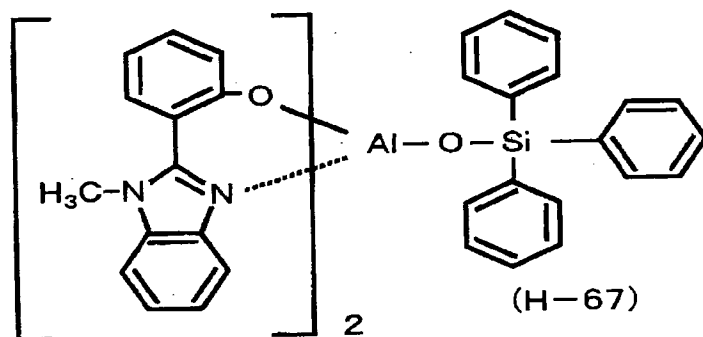
40

【 0 1 7 6 】

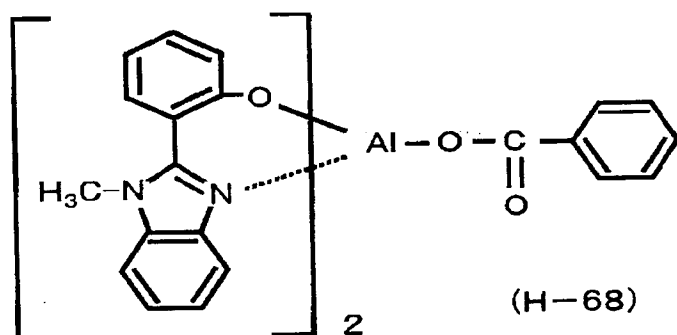
【 化 8 3 】



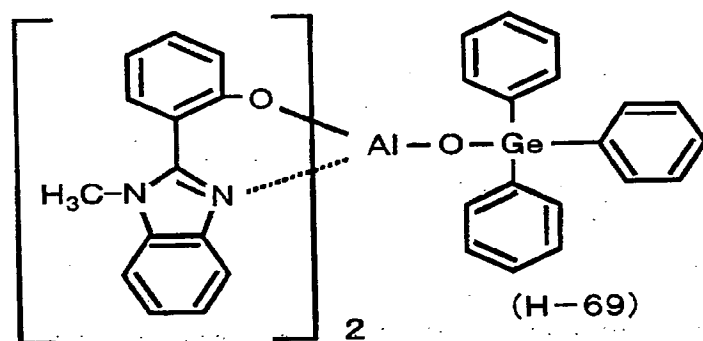
10 -



20



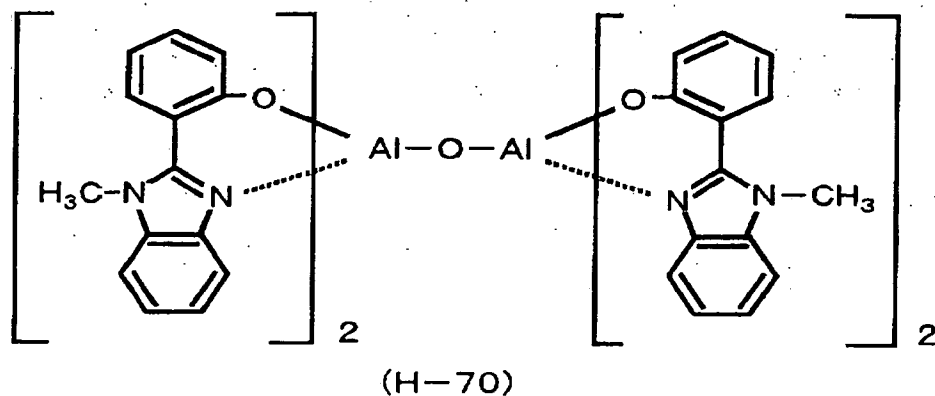
30



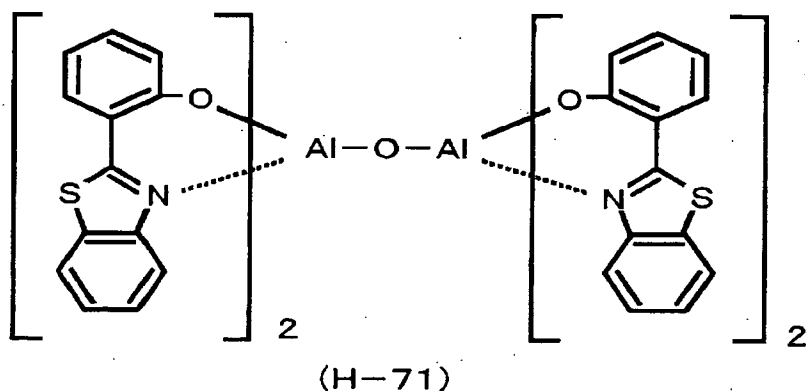
40

【 0 1 7 7 】

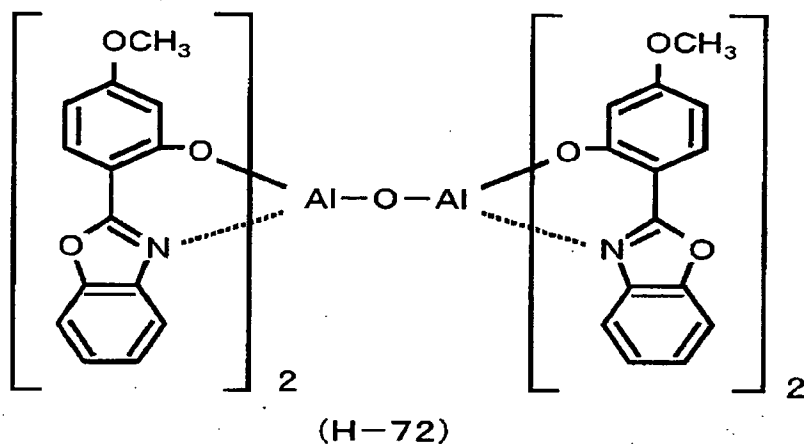
【 化 8 4 】



10



20



30

【0178】

また、本発明の有機電界発光素子は、発光層におけるホスト材料として、前記一般式 (I I I) で表される基を有する化合物を使用しても良い。

【0179】

前記一般式 (I I I) において、 R^{51} と R^{52} 、 R^{53} と R^{54} がそれぞれ結合して形成する環としては、ベンゼン環やシクロヘキサン環が挙げられる。

【0180】

前記一般式 (I I I) において、 $R^{51} \sim R^{54}$ は、具体的には、水素原子；ハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数 1～6 のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数 1～6 のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素

40

50

数 1 ～ 6 のアルコキシカルボニル基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリーロキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基などのジラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等の α -ハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表し、前記置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数 1 ～ 6 のアルキル基；ビニル基等のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数 1 ～ 6 のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数 1 ～ 6 のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリーロキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基が挙げられる。

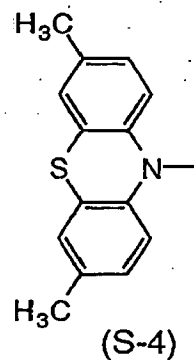
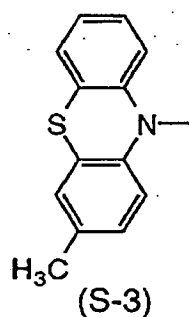
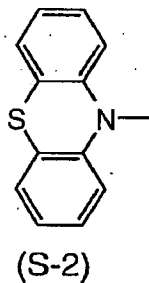
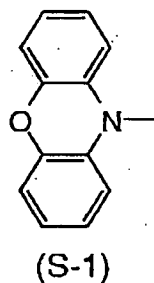
10.

【0181】

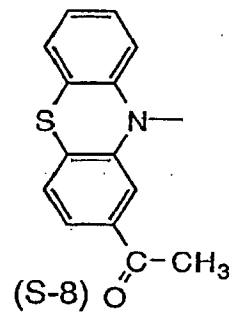
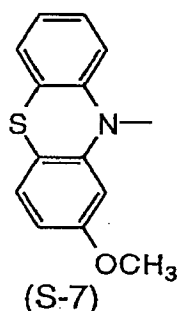
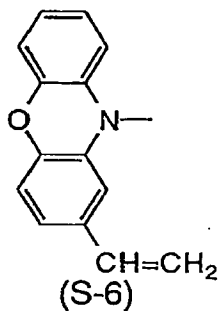
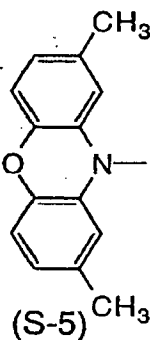
前記一般式 (I I I) で表わされる基の好ましい具体例を以下に示すが、これらに限定するものではない。

【0182】

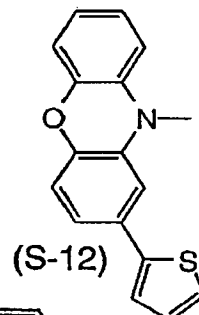
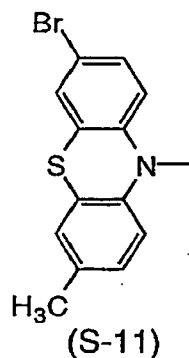
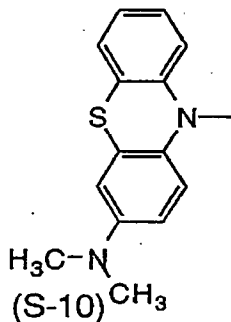
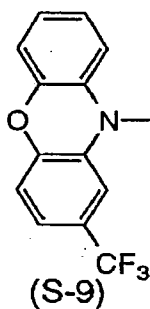
【化 8 5】



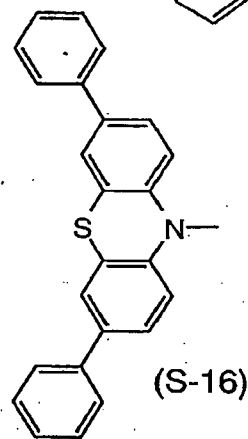
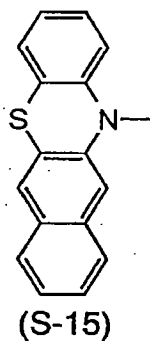
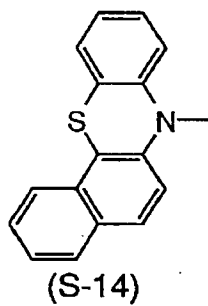
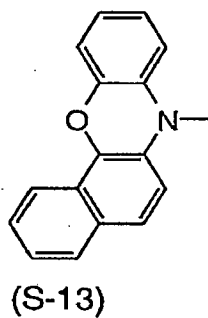
10



20



30



40

【0183】

前記一般式 (I I I) で表される基を有する化合物は、低分子であっても高分子であっても良い。高分子の場合は、主鎖に含有されていても良いし、また、側鎖として含有されていても良い。

【0184】

この化合物は分子量 400 ~ 1200 程度の低分子化合物である場合が好ましく、一般式 (I I I) で表される基を有する化合物は、化合物全体としての環の合計数が 6 ~ 20 であるのが好ましく、より好ましくは 7 ~ 18 である。また、一般式 (I I I) で表される

50

基を有する化合物は、分子内に一般式 (I I I) で表される単位を 2 ~ 3 個有している化合物が好ましい。

【0185】

中でも、一般式 (I I I) で表される基は、前記 (S-1) あるいは (S-2) であるのが特に好ましい。

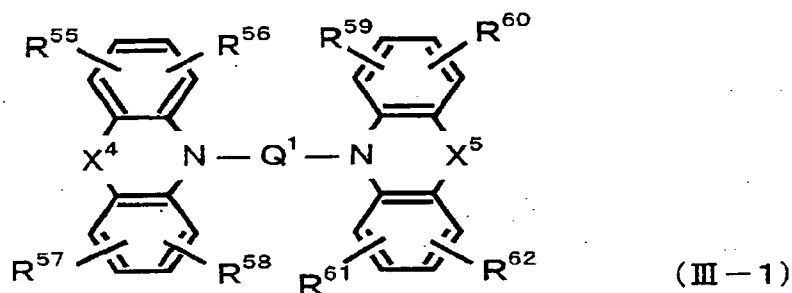
【0186】

一般式 (I I I) で表される基を有する化合物は、下記一般式 (I I I-1) または (I I I-2) で表される化合物であることが好ましい。

【0187】

【化86】

10



20

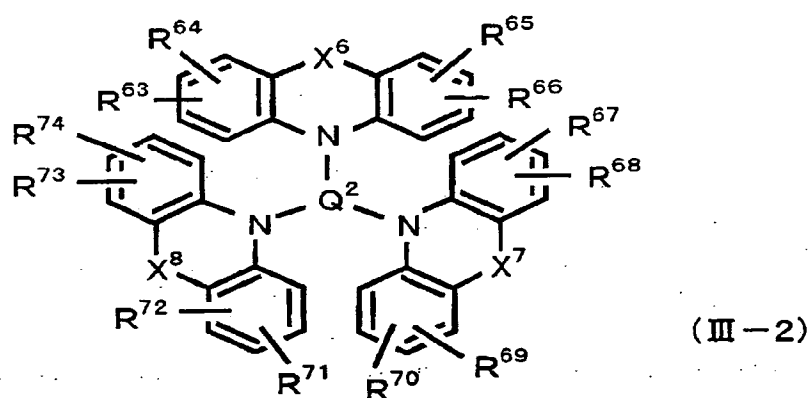
【0188】

(式中、 $R^{55} \sim R^{62}$ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、アリル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、 α -ハロアルキル基、水酸基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表し、 R^{55} と R^{56} 、 R^{57} と R^{58} 、 R^{59} と R^{60} 、 R^{61} と R^{62} はそれぞれ互いに結合して環を形成しても良い。 X^4 および X^5 は各々独立に、酸素原子または硫黄原子を示し、 Q^1 は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基からなる 2 価の連結基を示す。)

【0189】

【化87】

30



40

【0190】

(式中、 $R^{63} \sim R^{74}$ は各々独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、アリル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、 α -ハロアルキル基、水酸基、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基を表し、 R^{63} と R^{64} 、 R^{65} と R^{66} 、 R^{67} と R^{68} 、 R^{69} と R^{70} 、 R^{71} と R^{72} 、 R^{73} と R^{74} はそれぞれ互いに結合して環を形成しても良い。 X^6 および X^7 は各々独立に、酸素原子または硫黄原子を示し、 Q^2 は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基からなる 2 価の連結基を示す。)

50

R^{64} 、 R^{65} と R^{66} 、 R^{67} と R^{68} 、 R^{69} と R^{70} 、 R^{71} と R^{72} 、 R^{73} と R^{74} はそれぞれ互いに結合して環を形成しても良い。 $X^6 \sim X^8$ は各々独立に、酸素原子または硫黄原子を示し、 Q^2 は置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基がらなる3価の連結基を示す。)

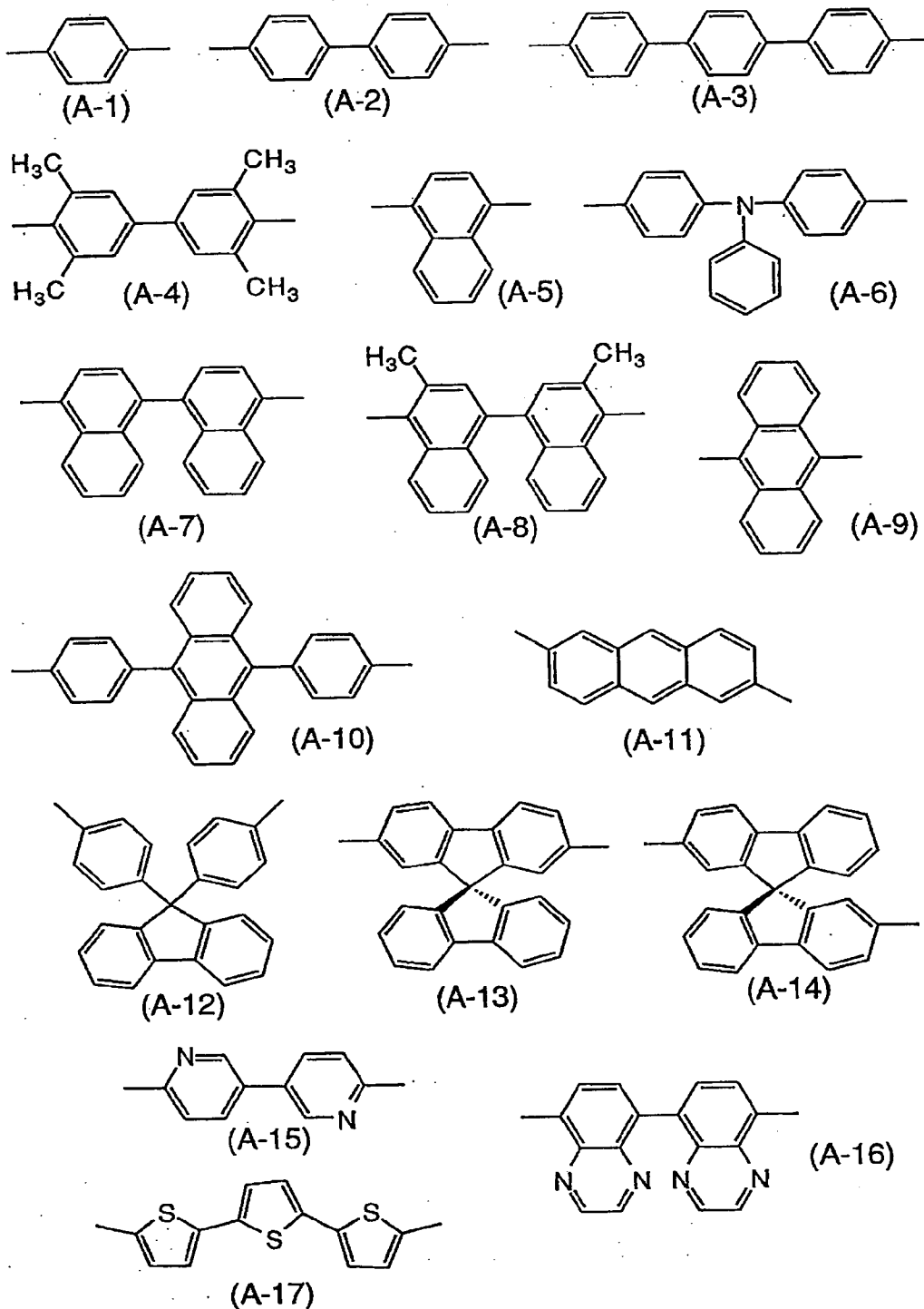
【0191】

前記一般式(I I I-1)において、 $R^{55} \sim R^{62}$ は各々独立に、水素原子；ハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1～6のアルコキシカルボニル基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリールオキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基などのジアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等の α -ハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表し、前記置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基を示す。 R^{55} と R^{56} 、 R^{57} と R^{58} 、 R^{59} と R^{60} 、 R^{61} と R^{62} はそれぞれ結合して、ベンゼン環、シクロヘキササン環等を形成しても良い。 $X^4 \sim X^5$ は各々独立に、酸素原子または硫黄原子を示す。 Q^1 は置換基を有していても良い芳香族芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基からなる2価の連結基を示し、この置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基などが挙げられる。

連結基 Q^1 の好ましい例を以下に示す。

【0192】

【化88】



10

20

30

40

50

【0193】

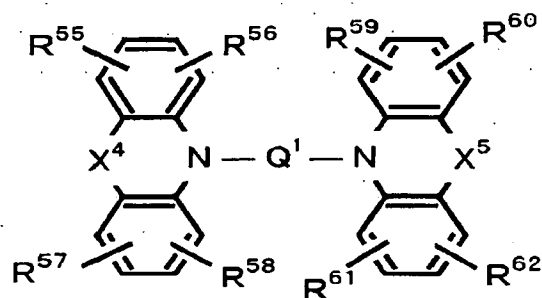
これらの中でも、連結基 Q^1 は、(A-2)、(A-6)、(A-8)、(A-10)あるいは(A-12)が好ましい。そして、これら連結基 Q^1 を有し、環構造として(S-1)または(S-2)を有する化合物であるものが最も好ましい。

【0194】

前記一般式(III-1)で表わされる化合物の好ましい具体例を表1、2に示すが、これらに限定するものではない。

【0195】

【表 1】



10

化合物番号	$R^{55} \sim R^{58}$ 置換部分	$R^{59} \sim R^{62}$ 置換部分	連続基 Q^1
(H-101)	(S-1)	(S-1)	(A-1)
(H-102)	(S-2)	(S-2)	(A-1)
(H-103)	(S-1)	(S-1)	(A-2)
(H-104)	(S-2)	(S-2)	(A-2)
(H-105)	(S-3)	(S-3)	(A-2)
(H-106)	(S-1)	(S-2)	(A-2)
(H-107)	(S-4)	(S-4)	(A-2)
(H-108)	(S-5)	(S-5)	(A-2)
(H-109)	(S-6)	(S-6)	(A-2)
(H-110)	(S-7)	(S-7)	(A-2)
(H-111)	(S-8)	(S-8)	(A-2)
(H-112)	(S-2)	(S-9)	(A-2)
(H-113)	(S-10)	(S-10)	(A-2)
(H-114)	(S-11)	(S-11)	(A-2)
(H-115)	(S-12)	(S-12)	(A-2)
(H-116)	(S-13)	(S-13)	(A-2)
(H-117)	(S-13)	(S-2)	(A-2)
(H-118)	(S-14)	(S-14)	(A-2)
(H-119)	(S-13)	(S-14)	(A-2)
(H-120)	(S-15)	(S-15)	(A-2)
(H-121)	(S-2)	(S-16)	(A-2)
(H-122)	(S-16)	(S-16)	(A-2)
(H-123)	(S-1)	(S-1)	(A-3)
(H-124)	(S-2)	(S-2)	(A-3)
(H-125)	(S-1)	(S-1)	(A-4)
(H-126)	(S-2)	(S-2)	(A-4)
(H-127)	(S-2)	(S-2)	(A-5)

20

30

40

【0196】

【表 2】

化合物番号	R ⁵⁵ ~R ⁵⁸ 置換部分	R ⁵⁹ ~R ⁶² 置換部分	連続基Q ¹
(H-128)	(S-1)	(S-1)	(A-6)
(H-129)	(S-2)	(S-2)	(A-6)
(H-130)	(S-3)	(S-3)	(A-6)
(H-131)	(S-1)	(S-1)	(A-7)
(H-132)	(S-2)	(S-2)	(A-7)
(H-133)	(S-1)	(S-1)	(A-8)
(H-134)	(S-2)	(S-2)	(A-8)
(H-135)	(S-3)	(S-3)	(A-8)
(H-136)	(S-1)	(S-1)	(A-9)
(H-137)	(S-2)	(S-2)	(A-9)
(H-138)	(S-1)	(S-1)	(A-10)
(H-139)	(S-2)	(S-2)	(A-10)
(H-140)	(S-1)	(S-2)	(A-10)
(H-141)	(S-3)	(S-3)	(A-10)
(H-142)	(S-4)	(S-4)	(A-10)
(H-143)	(S-7)	(S-7)	(A-10)
(H-144)	(S-10)	(S-10)	(A-10)
(H-145)	(S-13)	(S-13)	(A-10)
(H-146)	(S-14)	(S-14)	(A-10)
(H-147)	(S-1)	(S-2)	(A-11)
(H-148)	(S-2)	(S-2)	(A-11)
(H-149)	(S-1)	(S-1)	(A-12)
(H-150)	(S-2)	(S-2)	(A-12)
(H-151)	(S-2)	(S-2)	(A-13)
(H-152)	(S-2)	(S-2)	(A-14)
(H-153)	(S-2)	(S-2)	(A-15)
(H-154)	(S-1)	(S-1)	(A-16)
(H-155)	(S-2)	(S-2)	(A-17)

【0197】

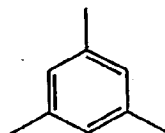
前記一般式 (I I I - 2) において、R⁶³ ~ R⁷⁴ は各々独立に、水素原子；ハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1~6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1~6のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1~6のアルコキシカルボニル基；フェノキシ基、ベンジロキシ基などのアリールオキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基などのジアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等のα-ハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表し、前記置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1~6のアルキル基；ビニル基等のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数1~6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキ

シ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基を示す。 $R^{6\ 3}$ と $R^{6\ 4}$ 、 $R^{6\ 5}$ と $R^{6\ 6}$ 、 $R^{6\ 7}$ と $R^{6\ 8}$ 、 $R^{6\ 9}$ と $R^{7\ 0}$ 、 $R^{7\ 1}$ と $R^{7\ 2}$ 、 $R^{7\ 3}$ と $R^{7\ 4}$ はそれぞれ互いに結合して、ベンゼン環、シクロヘキサン環等を形成していても良い。 $X^6 \sim X^8$ は各々独立に、酸素原子または硫黄原子を示す。 Q^2 は置換基を有していても良い芳香族芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基からなる3価の連結基を示し、この置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基等のアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基、アセチル基等のアシル基、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基、シアノ基などが挙げられる。
連結基 Q^2 の好ましい例を以下に示す。

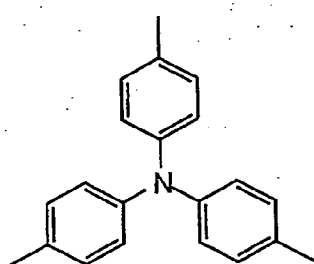
10

【0198】

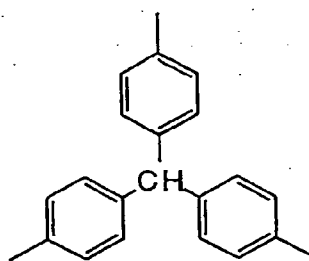
【化89】



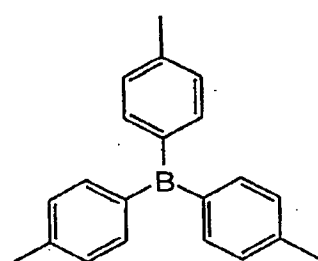
(B-1)



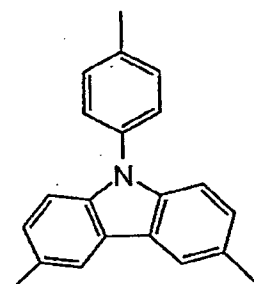
(B-2)



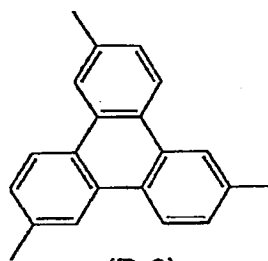
(B-3)



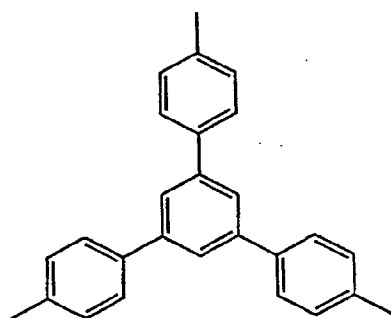
(B-4)



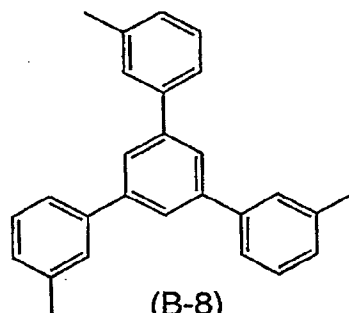
(B-5)



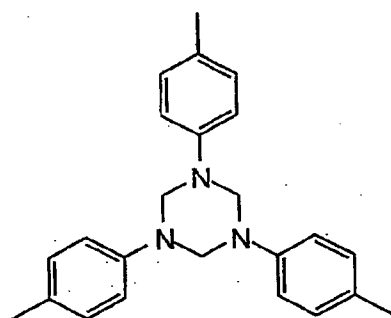
(B-6)



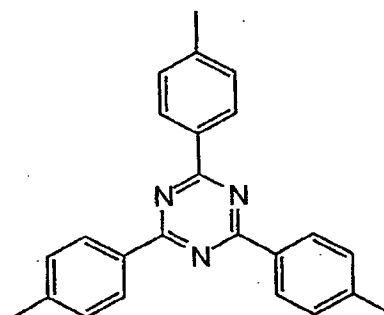
(B-7)



(B-8)



(B-9)



(B-10)

【0199】

これらの中でも連結基 Q^2 は、(B-1)、(B-2) あるいは (B-7) が好ましい。最も好ましくは、これら連結基を有し、環構造として (S-1) または (S-2) を有する場合である。

【0200】

前記一般式 (I I I-2) で表わされる化合物の好ましい具体例を表3, 4に示すが、これらに限定するものではない。

10

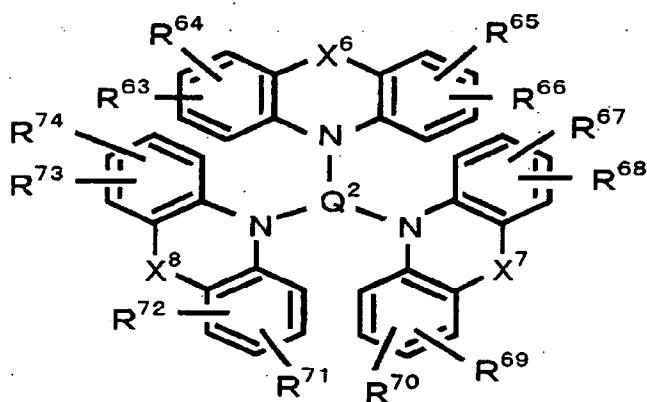
20

30

40

【 0 2 0 1 】

【 表 3 】



10

化合物番号	R ⁶³ ~R ⁶⁶ 置換部分	R ⁶⁷ ~R ⁷⁰ 置換部分	R ⁷¹ ~R ⁷⁴ 置換部分	連続基Q ²
(H-201)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-1)
(H-202)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-1)
(H-203)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-2)
(H-204)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-2)
(H-205)	(S-3)	(S-3)	(S-3)	(B-2)
(H-206)	(S-1)	(S-1)	(S-2)	(B-2)
(H-207)	(S-4)	(S-4)	(S-4)	(B-2)
(H-208)	(S-13)	(S-13)	(S-13)	(B-2)
(H-209)	(S-14)	(S-14)	(S-14)	(B-2)
(H-210)	(S-15)	(S-15)	(S-15)	(B-2)
(H-211)	(S-16)	(S-16)	(S-16)	(B-2)
(H-212)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-3)
(H-213)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-3)
(H-214)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-4)
(H-215)	(S-13)	(S-13)	(S-13)	(B-4)
(H-216)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-5)
(H-217)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-5)
(H-218)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-6)
(H-219)	(S-4)	(S-4)	(S-4)	(B-6)
(H-220)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-7)
(H-221)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-7)
(H-222)	(S-3)	(S-3)	(S-3)	(B-7)
(H-223)	(S-7)	(S-7)	(S-7)	(B-7)
(H-224)	(S-1)	(S-2)	(S-2)	(B-7)

20

30

40

【 0 2 0 2 】

【 表 4 】

化合物番号	R ⁶³ ~R ⁶⁶ 置換部分	R ⁶⁷ ~R ⁷⁰ 置換部分	R ⁷¹ ~R ⁷⁴ 置換部分	連続基Q ²
(H-225)	(S-10)	(S-10)	(S-10)	(B-7)
(H-226)	(S-13)	(S-13)	(S-13)	(B-7)
(H-227)	(S-14)	(S-14)	(S-14)	(B-7)
(H-228)	(S-15)	(S-15)	(S-15)	(B-7)
(H-229)	(S-16)	(S-16)	(S-16)	(B-7)
(H-230)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-8)
(H-231)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-8)
(H-232)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-9)
(H-233)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-9)
(H-234)	(S-1)	(S-1)	(S-1)	(B-10)
(H-235)	(S-2)	(S-2)	(S-2)	(B-10)
(H-236)	(S-13)	(S-13)	(S-13)	(B-10)
(H-237)	(S-14)	(S-14)	(S-14)	(B-10)

10

【0203】

前記一般式(I)で表される化合物、前記一般式(II)で表される化合物、および前記一般式(III)で表される基を有する化合物は、各々発光層中に1種のみが含まれていても良く、各2種以上が含まれていても良い。また、異なる一般式で表される化合物を併用しても良い。

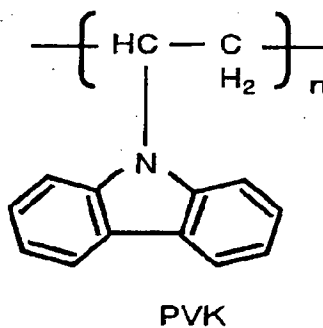
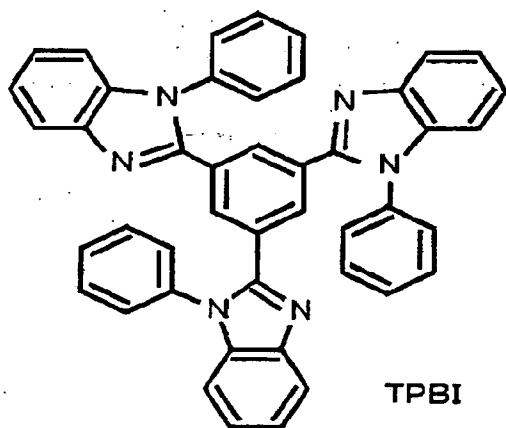
【0204】

また、ホスト化合物としては、前記一般式(I)~(III)のほかに、下記化合物等を使用しても良い。

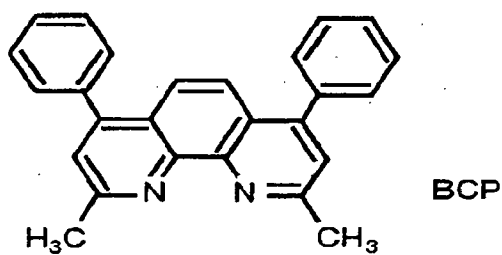
【0205】

【化90】

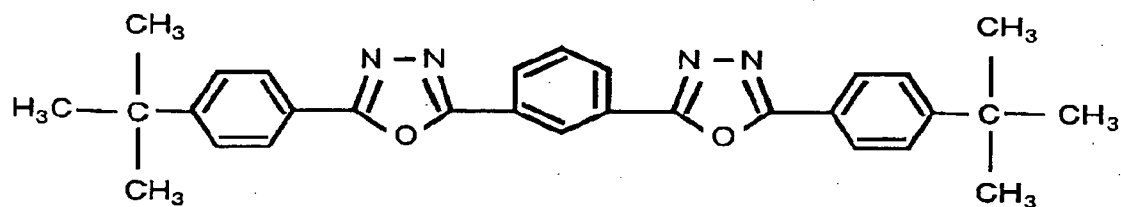
20



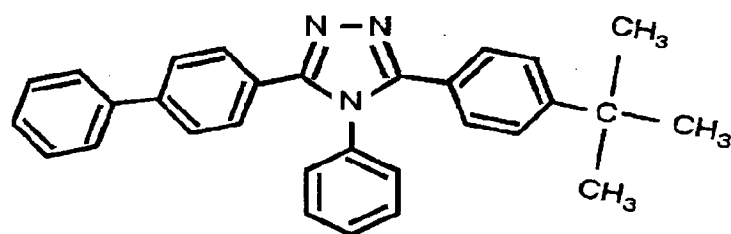
10



20



30

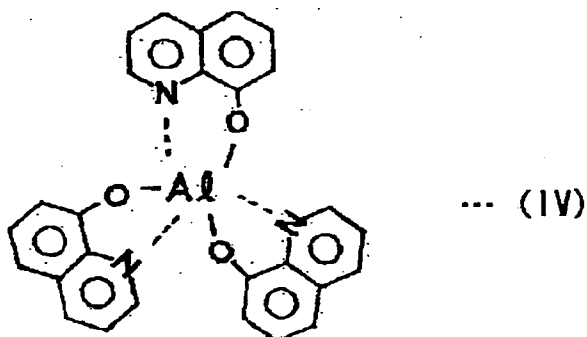


TAZ

40

【 0 2 0 6 】

【 化 9 1 】



【0207】

(上記式(IV)中、配位子である8-ヒドロキシキノリン構造は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等のハロゲン原子、あるいはメチル基、エチル基、t-ブチル基等の炭素数1~5の直鎖または分岐のアルキル基で置換されていても良い。なお1化合物中の3個の配位子は、同じ構造であっても異なっても良い。)

【0208】

ホスト化合物は、前述したように、同じ一般式で表わすことができる化合物を複数種併用しても良いし、また同じ一般式では表わせない化合物を2種以上併用しても良い。

【0209】

本発明の有機電界発光素子において、発光層のホスト化合物として特に好ましいのは前記一般式(I)で表わされる化合物、または前記一般式(IV)で表わされる化合物である。

【0210】

次に、本発明の有機電界発光素子の構造について、図面を参照しながら説明するが、本発明の有機電界発光素子の構造は何ら図示のものに限定されるものではない。

【0211】

図1~3は本発明の有機電界発光素子の実施の形態を模式的に示す断面図であり、1は基板、2は陽極、3は陽極バッファ層、4は正孔輸送層、5は発光層、6は正孔阻止層、7は電子輸送層、8は陰極を各々表わす。以下、図1に示す素子を中心に説明する。

【0212】

基板1は有機電界発光素子の支持体となるものであり、石英やガラスの板、金属板や金属箔、プラスチックフィルムやシートなどが用いられる。特にガラス板や、ポリエステル、ポリメタクリレート、ポリカーボネート、ポリスルホンなどの透明な合成樹脂の板が好ましい。合成樹脂基板を使用する場合にはガスバリア性に留意する必要がある。基板のガスバリア性が小さすぎると、基板を通過した外気により有機電界発光素子が劣化することがあるので好ましくない。このため、合成樹脂基板の少なくとも片面に緻密なシリコン酸化膜等を設けてガスバリア性を確保する方法も好ましい方法の一つである。

【0213】

基板1上には陽極2が設けられる。陽極2は正孔輸送層4への正孔注入の役割を果たすものである。この陽極2は、通常、アルミニウム、金、銀、ニッケル、パラジウム、白金等の金属、インジウムおよび/またはスズの酸化物などの金属酸化物、ヨウ化銅などのハロゲン化金属、カーボンブラック、あるいは、ポリ(3-メチルチオフェン)、ポリピロール、ポリアニリン等の導電性高分子などにより構成される。陽極2の形成は通常、スパッタリング法、真空蒸着法などにより行われることが多い。また、銀などの金属微粒子、ヨウ化銅などの微粒子、カーボンブラック、導電性の金属酸化物微粒子、導電性高分子微粉末などを用いる場合には、適当なバインダー樹脂溶液に分散し、基板1上に塗布することにより陽極2を形成することもできる。さらに、導電性高分子の場合は、電解重合により直接基板1上に薄膜を形成したり、基板1上に導電性高分子を塗布して陽極2を形成することもできる(Appl. Phys. Lett., 60巻, 2711頁, 1992年)。

また、陽極 2 は異なる材料からなる層を、積層して形成された積層構造であっても良い。

【0214】

陽極 2 の厚みは、必要とする透明性により異なる。透明性が必要とされる場合は、可視光の透過率を、通常、60%以上、好ましくは80%以上とすることが望ましく、この場合、陽極 2 の厚みの上限は通常1000nm好ましくは500nm程度であり、下限は通常5nm好ましくは10nm程度である。不透明でよい場合は陽極 2 の厚みは基板 1 と同程度でも良い。また、さらには上記の陽極 2 の上に異なる導電材料を積層することも可能である。

【0215】

図 1 の素子において、陽極 2 の上には正孔輸送層 4 が設けられる。正孔輸送層 4 の材料に要求される条件としては、陽極 2 からの正孔注入効率が高く、かつ、注入された正孔を効率良く輸送することができる材料であることが挙げられる。そのためには、イオン化ポテンシャルが小さく、可視光の光に対して透明性が高く、しかも正孔移動度が大きく、さらに安定性に優れ、トラップとなる不純物が製造時や使用時に発生しにくいことが要求される。また、発光層 5 に接するために発光層 5 からの発光を消光したり、発光層 5 との間でエキサイプレックスを形成して効率を低下させないことが求められる。上記の一般的要求以外に、車載表示用の応用を考えた場合、素子にはさらに耐熱性が要求されるため、ガラス転移温度 T_g として75℃以上の値を有する材料が望ましく、特に85℃以上の値を有する材料が好ましい。

【0216】

このような正孔輸送材料としては、例えば、4, 4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニルで代表される2個以上の3級アミンを含み2個以上の縮合芳香族環が窒素原子に置換した芳香族ジアミン(特開平5-234681号公報)、4, 4', 4"-トリリス(1-ナフチルフェニルアミノ)トリフェニルアミン等のスターバースト構造を有する芳香族アミン化合物(J. Lumin., 72-74巻、985頁、1997年)、トリフェニルアミンの四量体から成る芳香族アミン化合物(Chem. Commun., 2175頁、1996年)、2, 2', 7, 7'-テトラキス-(ジフェニルアミノ)-9, 9'-スピロピフルオレン等のスピロ化合物(Synth. Metals, 91巻、209頁、1997年)等が挙げられる。これらの化合物は、単独で用いても良いし、必要に応じて、各々、混合して用いても良い。

【0217】

上記の化合物以外に、正孔輸送層 4 の材料として、ポリビニルカルバゾール、ポリビニルトリフェニルアミン(特開平7-53953号公報)、テトラフェニルベンジジンを含むポリアリーレンエーテルサルホン(Polym. Adv. Tech., 7巻、33頁、1996年)等の高分子材料が挙げられる。

【0218】

正孔輸送層 4 は塗布法または真空蒸着法などで形成することができる。

正孔輸送層 4 を塗布法で形成する場合は、正孔輸送材料の1種または2種以上に、必要により正孔のトラップにならないバインダー樹脂や塗布性改良剤などの添加剤を添加し、溶解して塗布溶液を調製し、スピンコート法などの方法により陽極 2 上に塗布し、乾燥して正孔輸送層 4 を形成する。バインダー樹脂としては、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエステル等が挙げられる。バインダー樹脂は添加量が多いと正孔移動度を低下させるので、少ない方が望ましく、通常、正孔輸送層 4 中の含有量で50重量%以下が好ましい。

【0219】

正孔輸送層 4 を真空蒸着法で形成する場合には、正孔輸送材料を真空容器内に設置されたルツボに入れ、真空容器内を適当な真空ポンプで 1.0×10^{-4} Pa程度にまで排気した後、ルツボを加熱して、正孔輸送材料を蒸発させ、ルツボと向き合って置かれた、陽極 2 が形成された基板 1 上に正孔輸送層 4 を形成させる。

【0220】

10

20

30

40

50

正孔輸送層 4 の膜厚の上限は通常 300 nm 好ましくは 100 nm であり、下限は通常 5 nm 好ましくは 10 nm である。このように薄い膜を一樣に形成するためには、一般に真空蒸着法がよく用いられる。

【0221】

正孔輸送層 4 の上には発光層 5 が設けられる。発光層 5 は、少なくとも一般式 (1) で表される本発明の有機金属錯体を含有し、通常は、更に前述した各種ホスト化合物を含有する。この発光層 5 は、電界を与えられた電極間において、陽極 2 から注入されて正孔輸送層 4 を移動する正孔と、陰極 8 から注入されて電子輸送層 7 を移動する電子との再結合により励起されて、強い発光を示す。その発光スペクトルにおける最大発光波長は、本発明の有機金属錯体に由来するものである。発光層への本発明の有機金属錯体の使用は、前述のように、比較的長波長、特に波長 500 nm 以上に発光ピークを有する素子を得る場合に好ましく、波長 550 nm 以上に発光ピークを有する素子を得る場合に最も好ましい。

10

【0222】

なお、本発明の有機電界発光素子の発光層中には、本発明の有機金属錯体の 1 種が単独で含まれていても良く、2 種以上が含まれていても良い。また、本発明の性能を損なわない範囲で、本発明の有機金属錯体および前述のホスト化合物に加えて、これら以外の成分を含有していても良い。

【0223】

例えば発光層に、(1) 前述のホスト化合物、および (2) 本発明の有機金属錯体に加えて、(3) 室温で燐光発光を示し、その最大発光波長が (2) の本発明の有機金属錯体の最大発光波長より短波長である化合物を含有していても良い。この場合には、上記 (3) の化合物を併用することにより、この (3) の化合物が増感剤の役割を果たし、(2) の本発明の有機金属錯体の発光が強められるという効果が奏される。

20

【0224】

上記 (3) の化合物は、一般式 (1) で表される本発明の有機金属錯体の中から選択することもでき、また本明細書内で引用した各種文献・特許中に記載の公知の燐光性化合物の中から選んでも良い。この化合物としては、上記 (3) の条件を満たす限り、その構造に制限はない。

【0225】

燐光発光を示す、一般式 (1) で表される本発明の有機金属錯体の含有量は、発光層全体に対し 0.1 ~ 30 重量% の範囲が好ましい。発光層中の本発明の有機金属錯体の含有量が 0.1 重量% 未満では、素子の発光効率向上に十分に寄与することができない可能性があり、30 重量% を超えると濃度消光が生じ、発光効率の低下が起こる虞がある。

30

【0226】

一般式 (1) で表される本発明の化合物は、発光層内に均一に存在していても良く、膜厚方向に濃度分布をもって、不均一に存在していても良い。

【0227】

発光層 5 の膜厚の上限は通常 200 nm 好ましくは 100 nm であり、下限は通常 10 nm 好ましくは 20 nm である。

40

【0228】

発光層 5 も正孔輸送層 4 と同様の方法で形成することができる。

【0229】

図 1 の有機電界発光素子においては、発光層 5 の上に電子輸送層 7 が設けられる。

【0230】

電子輸送層 7 は、電界を与えられた電極間において陰極 8 から注入された電子を効率良く発光層 5 の方向に輸送することができる化合物より形成される。

【0231】

従って、電子輸送層 7 に用いられる電子輸送材料としては、陰極 8 からの電子注入効率が高く、かつ、高い電子移動度を有し注入された電子を効率良く輸送することができる材料であることが必要である。

50

【0232】

このような条件を満たす材料としては、8-ヒドロキシキノリンのアルミニウム錯体などの金属錯体（特開昭59-194393号公報）、10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリンの金属錯体、オキサジアゾール誘導体、ジスチリルビフェニル誘導体、シロール誘導体、3-または5-ヒドロキシフラボン金属錯体、ベンズオキサゾール金属錯体、ベンゾチアゾール金属錯体、トリスベンズイミダゾリルベンゼン（米国特許第5,645,948号）、キノキサリン化合物（特開平6-207169号公報）、フェナントロリン誘導体（特開平5-331459号公報）、2-*t*-ブチル-9,10-N,N'-ジシアノアントラキノンジイミン、*n*型水素化非晶質炭化シリコン、*n*型硫化亜鉛、*n*型セレン化亜鉛などが挙げられる。

10

【0233】

また、上述のような電子輸送材料に、アルカリ金属をドーブする（特開平10-270171号公報、特願2000-285656号、特願2000-285657号などに記載）ことにより、電子輸送性が向上するため好ましい。

【0234】

電子輸送層7の膜厚の上限は通常200nm好ましくは100nmであり、下限は通常5nm好ましくは10nmである。

【0235】

電子輸送層7は、正孔輸送層4と同様にして塗布法あるいは真空蒸着法により発光層5上に積層することにより形成される。通常は、真空蒸着法が用いられる。

20

【0236】

陰極8は、電子輸送層7を介して発光層5に電子を注入する役割を果たす。陰極8として用いられる材料は、前記陽極2に使用される材料を用いることが可能であるが、効率良く電子注入を行なうには、仕事関数の低い金属が好ましく、スズ、マグネシウム、インジウム、カルシウム、アルミニウム、銀等の適当な金属またはそれらの合金が用いられる。具体例としては、マグネシウム-銀合金、マグネシウム-インジウム合金、アルミニウム-リチウム合金等の低仕事関数合金電極が挙げられる。

【0237】

陰極8の膜厚は通常、陽極2と同様である。

【0238】

低仕事関数金属から成る陰極を保護する目的で、この上にさらに、仕事関数が高く大気に対して安定な金属層を積層することは素子の安定性を増す上で好ましい。この目的のために、アルミニウム、銀、銅、ニッケル、クロム、金、白金等の金属が使われる。

30

【0239】

素子の発光効率をさらに向上させることを目的として、図2および図3に示す如く、電子輸送層7と発光層5との間に正孔阻止層6を設けても良い。

【0240】

正孔阻止層6は発光層5の上に、発光層5の陰極側の界面に接するように積層され、正孔輸送層4から移動してくる正孔が陰極8に到達するのを阻止する役割と、陰極8から注入された電子を効率良く発光層5の方向に輸送することができる化合物より形成される。正孔阻止層6を構成する材料に求められる物性としては、電子移動度が高く正孔移動度が低いことが必要とされる。正孔阻止層6は正孔と電子を発光層5内に閉じこめて、発光効率を向上させる機能を有する。

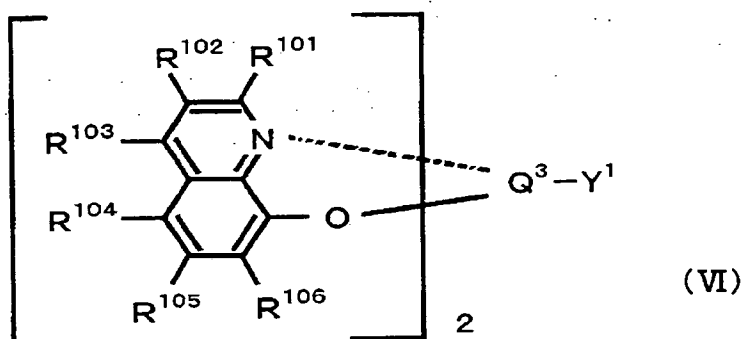
40

【0241】

このような条件を満たす正孔阻止材料として、好ましくは、下記一般式(VI)で表わされる混合配位子錯体が挙げられる。

【0242】

【化92】



10

【0243】

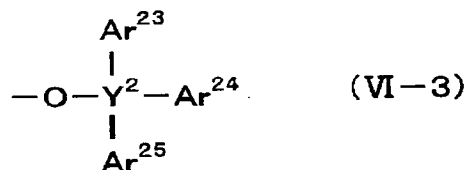
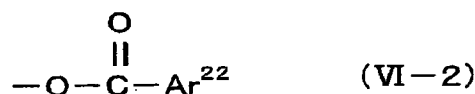
(VI) 式中、 $R^{101} \sim R^{106}$ は、水素原子または任意の置換基を表わす。 Q^3 はアルミニウム、ガリウム、インジウムから選ばれる金属原子を表わす。 Y^1 は以下に示す一般式 (VI-1)、(VI-2)、(VI-3) のいずれかで表わされる。

【0244】

【化93】



20



30

(式中、 $Ar^{21} \sim Ar^{25}$ は、置換基を有していても良い芳香族炭化水素環基または置換基を有していても良い芳香族複素環基を表し、 Y^2 はシリコンまたはゲルマニウムを表わす。))

【0245】

前記一般式 (VI) において、 $R^{101} \sim R^{106}$ は各々独立に水素原子または任意の置換基を表すが、好ましくは水素原子；塩素、臭素等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数 1～6 のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等の炭素数 2～6 のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数 1～6 のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数 2～6 のアルコキシカルボニル基；カルボキシ基；フェノキシ基、ベンジロキシ基などのアリールオキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基などのアラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；水酸基；置換基を有していても良いフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していても良いチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表わす。

40

【0246】

前記芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基が有しうる置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数 1～6 のアルキル基；ビニル基等の炭素数 2～6 のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数 2～

50

6 のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数 1 ～ 6 のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリーロキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のアルキルアミノ基；アセチル基等のアシル基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；シアノ基等が挙げられる。

【0247】

$R^{101} \sim R^{106}$ としてより好ましくは水素原子、アルキル基、ハロゲン原子またはシアノ基が挙げられる。また R^{104} としては、シアノ基が特に好ましい。

【0248】

上記一般式 (VI) 中、 $Ar^{21} \sim Ar^{25}$ として、具体的には、置換基を有していても良いフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基またはチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基が挙げられる。中でも 5 員環、6 員環、5 員環および／または 6 員環が 2 個または 3 個縮合したもの、あるいはこれらが直接結合で 2 個または 3 個結合したものが好ましい。芳香族炭化水素環基と芳香族複素環基では、芳香族炭化水素環基が好ましい。

10

【0249】

なお $Ar^{21} \sim Ar^{25}$ が有しうる置換基としては、例えば $R^{101} \sim R^{106}$ が芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基の場合に有しうる置換基として、前述したものと同様の基が挙げられる。

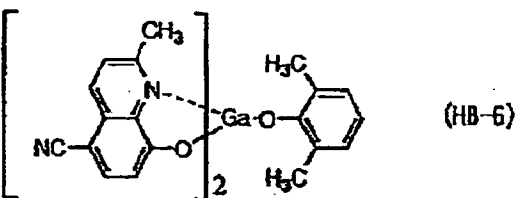
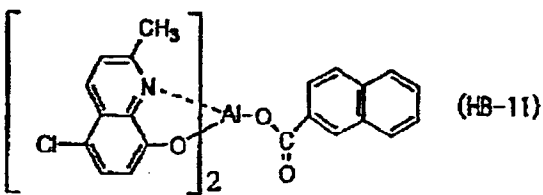
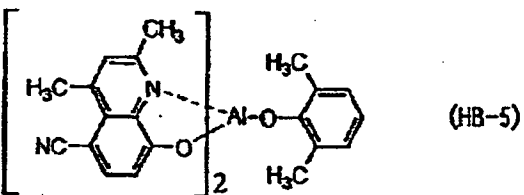
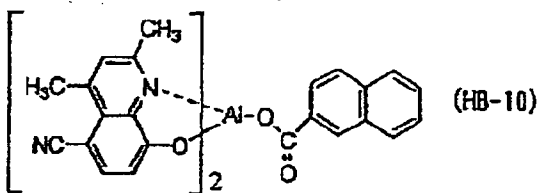
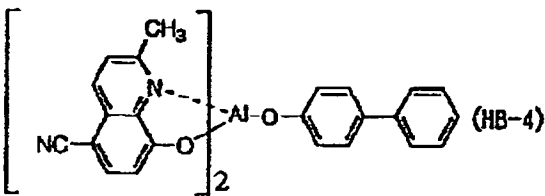
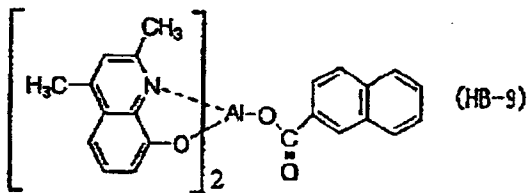
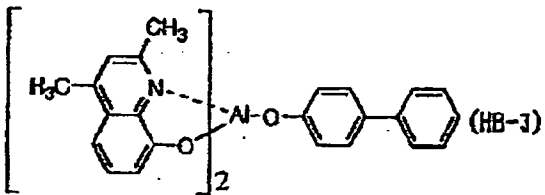
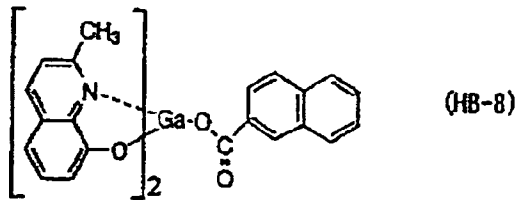
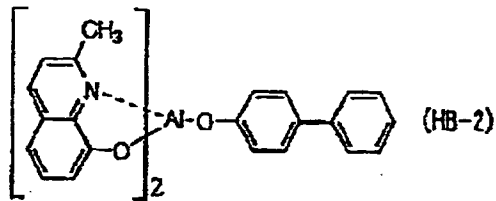
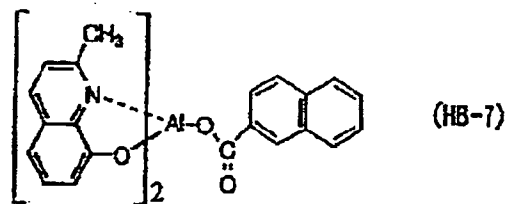
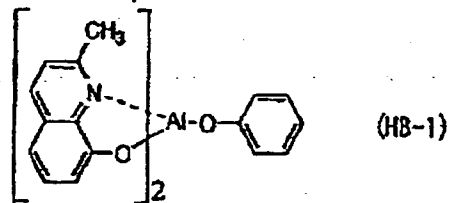
【0250】

前記一般式 (VI) で表わされる化合物の好ましい具体例を以下に示すが、これらに限定するものではない。

20

【0251】

【化94】



【 0 2 5 2 】

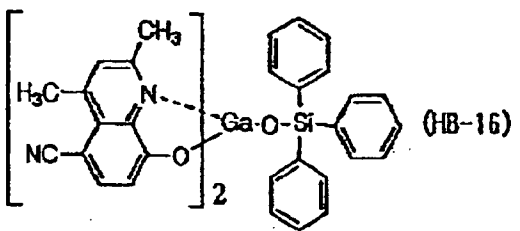
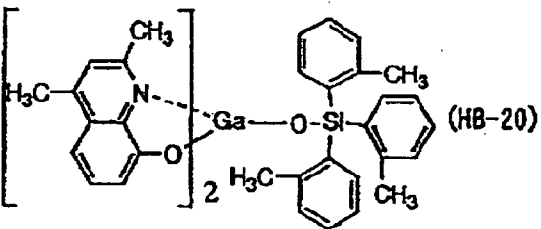
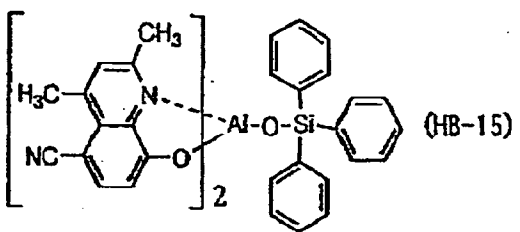
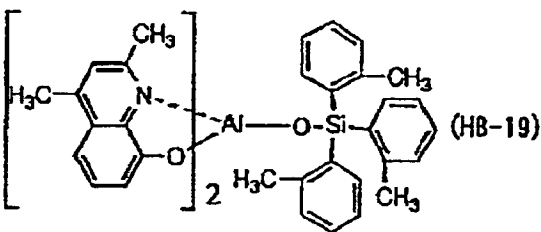
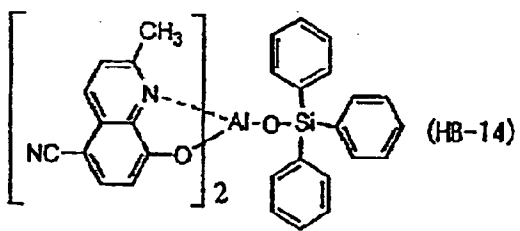
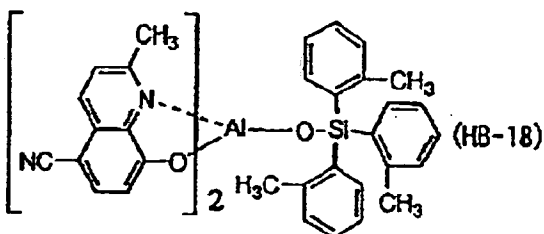
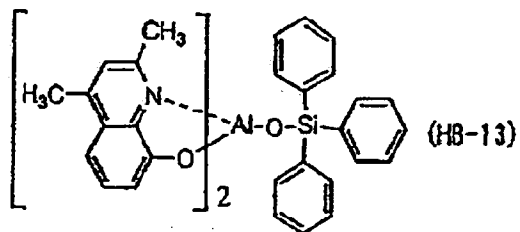
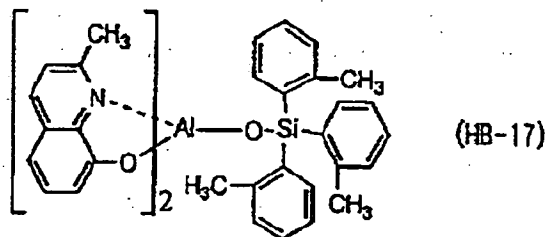
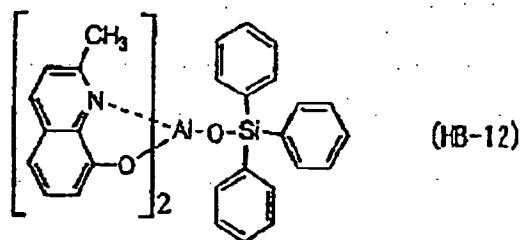
【 化 9 5 】

10

20

30

40



【0253】

正孔阻止材料としては、前記一般式(VI)の混合配位子錯体の他に、以下の構造式で示される1, 2, 4-トリアゾール環残基を少なくとも1個有する化合物も用いることができる。

【0254】

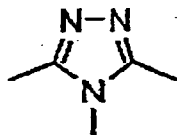
【化9.6】

10

20

30

40



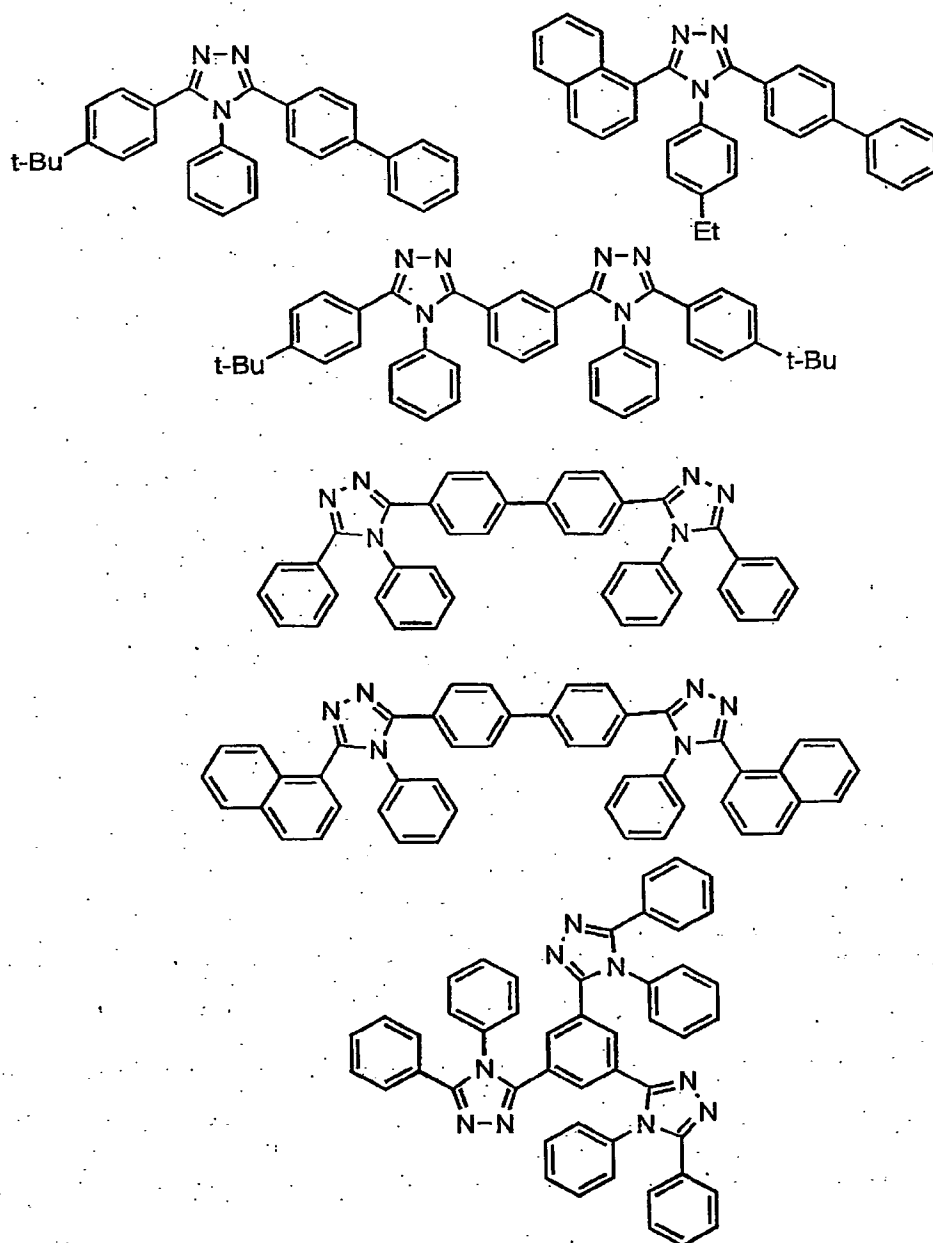
【0255】

上記構造式で表わされる 1, 2, 4-トリアゾール環残基を少なくとも 1 個有する化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

10

【0256】

【化97】



20

30

40

50

【0257】

なお、上記構造式中には記載していないが、これらの化合物におけるベンゼン環およびナ

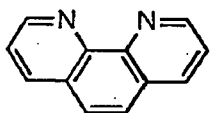
フタレン環は、更に置換基を有していても良い。該置換基としては、例えば $R^{101} \sim R^{106}$ が芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基である場合に有しうる置換基として、前述したものと同様の基が挙げられる。

【0258】

正孔阻止材料として、さらに、以下の構造式で示されるフェナントロリン環を少なくとも1個有する化合物も用いることができる。

【0259】

【化98】



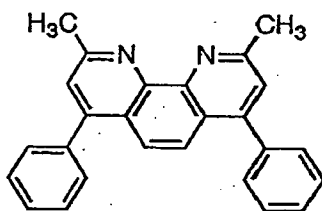
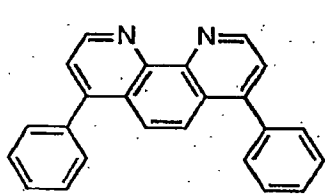
10

【0260】

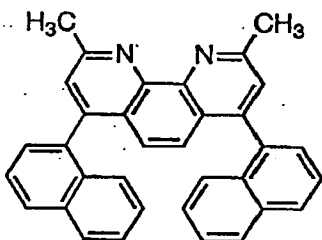
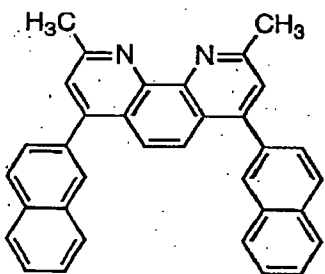
上記構造式で表わされるフェナントロリン環を少なくとも1個有する化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

【0261】

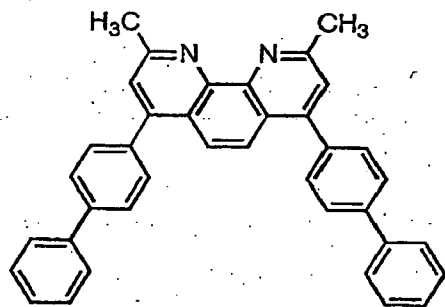
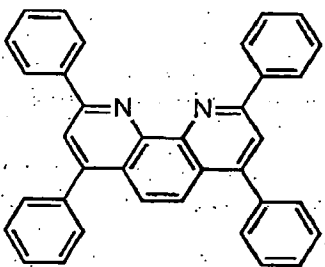
【化99】



20



30



40

【0262】

これらの化合物についても、前記1, 2, 4-トリアゾール環残基を有する化合物の場合と同様、構造式中に明記したもの以外にも置換基を有していても良く、この場合の置換基としては、例えば $R^{101} \sim R^{106}$ が芳香族炭化水素環基または芳香族複素環基である場合に有しうる置換基として、前述したものと同様の基が挙げられる。

50

【0263】

なお、上述した各々の正孔阻止材料の化合物は正孔阻止層6中に、単独で用いても良いし、必要に応じて、2種以上を混合して用いても良い。

【0264】

正孔阻止層6の膜厚の上限は通常100nm好ましくは50nmであり、下限は通常、0.3nm好ましくは0.5nmである。正孔阻止層6も正孔輸送層4や電子輸送層7と同様の方法で形成することができるが、通常は真空蒸着法が用いられる。

【0265】

また、正孔注入の効率をさらに向上させ、かつ、有機層全体の陽極2への付着力を改善させる目的で、図3に示す如く、正孔輸送層4と陽極2との間に陽極バッファ層3を挿入することも行われている。陽極バッファ層3を挿入することで、初期の素子の駆動電圧が下げると同時に、素子を定電流で連続駆動した時の電圧上昇も抑制される効果が得られる。陽極バッファ層3に用いられる材料に要求される条件としては、陽極2とのコンタクトがよく均一な薄膜が形成でき、熱的に安定、すなわち、融点及びガラス転移温度 T_g が高く、融点としては300℃以上、ガラス転移温度 T_g としては100℃以上が要求される。さらに、イオン化ポテンシャルが低く陽極2からの正孔注入が容易なこと、正孔移動度が大きいことが挙げられる。

10

【0266】

この目的のために、陽極バッファ層3の材料としては、これまでに銅フタロシアニン等のフタロシアニン化合物（特開昭63-295695号公報）、ポリアニリン（Appl. Phys. Lett., 64巻、1245頁、1994年）、ポリチオフェン（Optical Materials, 9巻、125頁、1998年）等の有機化合物や、スパッタ・カーボン膜（Synth. Met., 91巻、73頁、1997年）や、バナジウム酸化物、ルテニウム酸化物、モリブデン酸化物等の金属酸化物（J. Phys. D, 29巻、2750頁、1996年）が報告されている。

20

【0267】

また、正孔注入・輸送性の低分子有機化合物と電子受容性化合物を含有する層（特開平11-251067号公報、特開2000-159221号公報等に記載）や、芳香族アミノ基等を有する非共役系高分子化合物に、必要に応じて電子受容性化合物をドーピングしてなる層（特開平11-283750号公報、特開2000-36390号公報、特開2000-150168号公報、特開2001-223084号公報など）なども、好ましい。

30

【0268】

陽極バッファ層3も、正孔輸送層4と同様にして薄膜形成可能であるが、無機物の場合には、さらに、スパッタ法や電子ビーム蒸着法、プラズマCVD法が用いられる。以上の様にして形成される陽極バッファ層3の膜厚の上限は通常100nm好ましくは50nmであり、下限は通常3nm好ましくは5nmである。

【0269】

さらに、陰極8の発光層5側界面に接するようにLiF、 MgF_2 、 Li_2O 等の極薄絶縁膜（膜厚0.1~5nm）を挿入することも、素子の効率を向上させる有効な方法である（Appl. Phys. Lett., 70巻、152頁、1997年；特開平10-74586号公報；IEEE Trans. Electron. Devices, 44巻、1245頁、1997年）。

40

【0270】

なお、図1とは逆の構造、すなわち、基板1上に陰極8、正孔阻止層6、発光層5、正孔輸送層4、陽極2の順に積層することも可能であり、既述したように少なくとも一方が透明性の高い2枚の基板の間に本発明の有機電界発光素子を設けることも可能である。同様に、図2および図3に示した前記各層構成とは逆の構造に積層することも可能である。更に、図1、図2および図3に示した各層以外にも、陽極2または陰極8と発光層5との間に任意の層を有していても良い。

50

【0271】

本発明は、有機電界発光素子が、単一の素子、アレイ状に配置された構造からなる素子、陽極と陰極がX-Yマトリックス状に配置された構造のいずれにおいても適用することができる。

【0272】

【実施例】

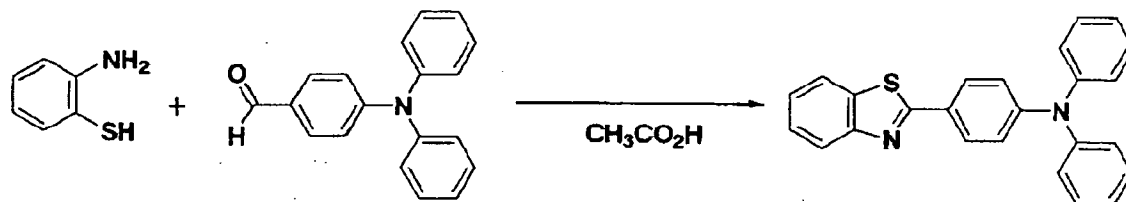
次に、合成例、実施例及び比較例を挙げて、本発明をより具体的に説明するが、本発明はその要旨を超えない限り、以下の実施例の記載に何ら限定されるものではない。

【0273】

合成例1

【化100】

10



【0274】

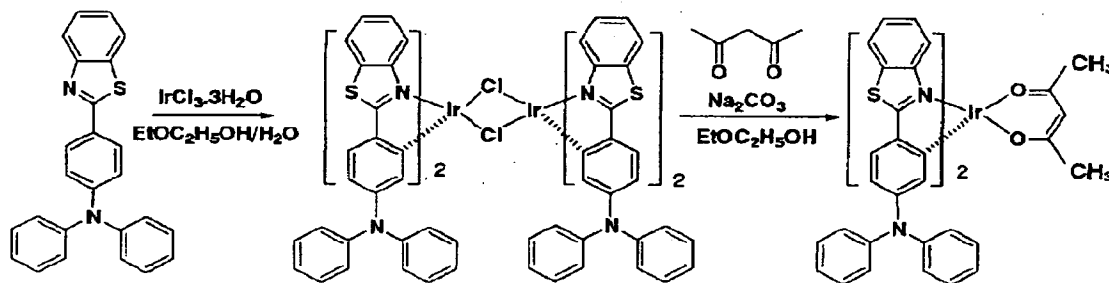
2-アミノチオフェノール 4.1 gと4-ジフェニルアミノベンズアルデヒド 8.3 gの混合物に酢酸 100 mLを加え、40℃で8.5時間反応させた。室温まで冷却した後、水酸化ナトリウム水溶液で中和し、トルエン溶媒を用いて抽出を行った。有機層を炭酸カリウムで乾燥した後、溶媒を除去し、カラムクロマトグラフィーによる精製を行い、7.7 gの黄白色結晶を得た。得られた化合物の質量分析結果により目的物であることが確認できた。M/e : 378

20

【0275】

実施例1

【化101】



30

【0276】

合成例1で得られた化合物 643 mgと三塩化イリジウム3水和物 282 mgに2-エトキシエタノール 10 mL水 3 mLを加え、窒素下、120℃で4時間反応させた。室温まで冷却した後、得られた沈殿物を濾過し、メタノール洗浄を行った。得られた沈殿物を乾燥後、炭酸ナトリウム 84 mg、2-エトキシエタノール 20 mL、アセチルアセトン 0.15 mLを加え、窒素下でさらに8時間反応させた。得られた沈殿物を濾過し、メタノール洗浄を行い、カラムクロマトグラフィーにより精製を行い、320 mgの赤色結晶を得た。得られた化合物の質量分析結果により目的物であることが確認できた。M/e : 1046

40

【0277】

実施例2

図3に示す構造を有する有機電界発光素子を以下の方法で作製した。

ガラス基板1上にインジウム・スズ酸化物(ITO)透明導電膜を150nm堆積したもの(ジオマテック社製;電子ビーム成膜品;シート抵抗15Ω)を通常のフォトリソグ

50

ラフィ技術と塩酸エッチングを用いて 2 mm 幅のストライプにパターンニングして陽極 2 を形成した。

【0278】

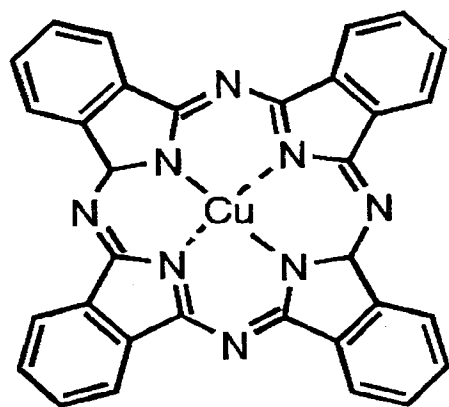
パターン形成した ITO 基板を、アセトンによる超音波洗浄、純水による水洗、イソプロピルアルコールによる超音波洗浄の順で洗浄後、窒素ブローで乾燥させ、最後に紫外線オゾン洗浄を行って、真空蒸着装置内に設置した。上記装置の粗排気を油回転ポンプにより行った後、装置内の真空度が 1.4×10^{-6} Torr (約 1.9×10^{-4} Pa) 以下になるまで液体窒素トラップを備えた油拡散ポンプを用いて排気した。

【0279】

陽極バッファ層 3 の材料として、下記に示す構造式の銅フタロシアニンをモリブデンボートを用いて、蒸着速度 0.15 nm/秒 、真空度 1.0×10^{-6} Torr (約 1.3×10^{-4} Pa) で、 10 nm の膜厚で陽極 2 の上に成膜した。

【0280】

【化102】

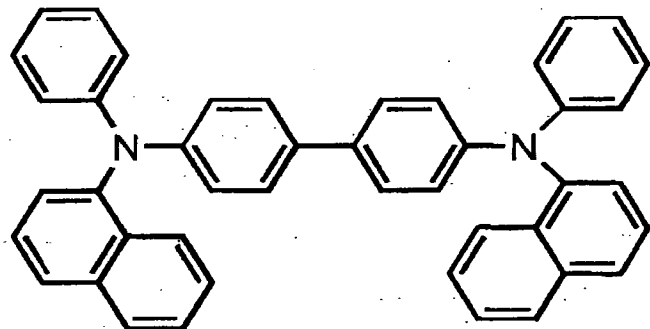


【0281】

次に、上記装置内に配置されたセラミックるつぼに入れた、以下に示す、4, 4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニルをるつぼの周囲のタantal線ヒーターで加熱して蒸着を行った。この時のるつぼの温度は、 $220 \sim 235^\circ\text{C}$ の範囲で制御した。蒸着時の真空度 0.9×10^{-6} Torr (約 1.2×10^{-4} Pa)、蒸着速度は 0.22 nm/秒 で膜厚 60 nm の正孔輸送層 4 を得た。

【0282】

【化103】

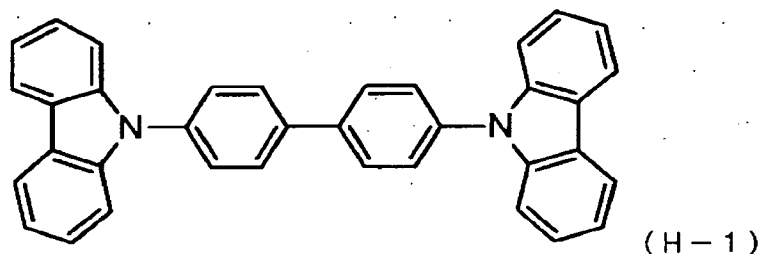


【0283】

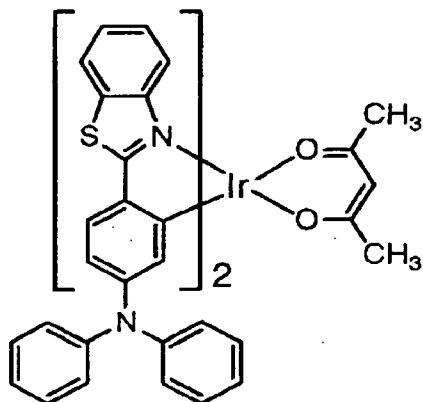
引続き、発光層 5 の主成分 (ホスト材料) として下記に示す N-フェニルカルbazol誘導体 (H-1) を、副成分 (ドーパント) として、実施例 1 で得られた有機イリジウム錯体 (T-1) を別々のセラミックるつぼに設置し、2 元同時蒸着法により成膜を行った。

【0284】

【化104】



10



20

【0285】

化合物 (H-1) のるつぼ温度は 250～260℃に、蒸着速度は 0.18 nm/秒に制御し、イリジウム錯体 (T-1) は 315～325℃の温度範囲に制御し、膜厚 30 nm でイリジウム錯体 (T-1) が 5 重量% 含有された発光層 5 を正孔輸送層 4 の上に積層した。蒸着時の真空度は 0.8×10^{-6} Torr (約 1.1×10^{-4} Pa) であった。

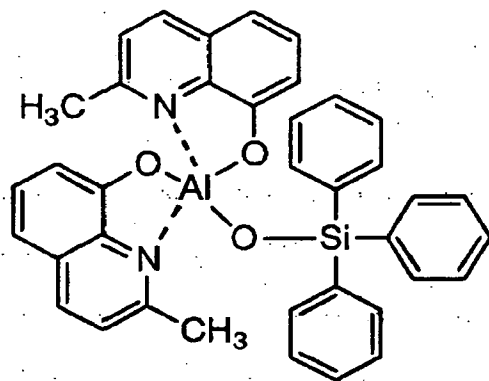
【0286】

30

さらに、正孔阻止層 6 として例示化合物 (HB-12) をるつぼ温度を 256℃として、蒸着速度 0.20 nm/秒で 10 nm の膜厚で積層した。蒸着時の真空度は 0.8×10^{-6} Torr (約 1.1×10^{-4} Pa) であった。

【0287】

【化105】



40

【0288】

正孔阻止層 6 の上に、電子輸送層 7 として以下の構造式に示すアルミニウムの 8-ヒドロ 50

キシキノリン錯体、 $\text{Al}(\text{C}_9\text{H}_6\text{NO})_3$ を同様にして蒸着した。この時のアルミニウムの8-ヒドロキシキノリン錯体のるつぼ温度は $290 \sim 300^\circ\text{C}$ の範囲で制御し、蒸着時の真空度は $0.8 \times 10^{-6} \text{ Torr}$ (約 $1.1 \times 10^{-4} \text{ Pa}$)、蒸着速度は 0.22 nm/秒 で膜厚は 35 nm とした。

【0289】

【化106】



10

【0290】

上記の正孔輸送層4、発光層5、正孔阻止層6及び電子輸送層7を真空蒸着する時の基板温度は室温に保持した。

20

【0291】

ここで、電子輸送層7までの蒸着を行った素子を一度前記真空蒸着装置内より大気中に取り出して、陰極蒸着用のマスクとして 2 mm 幅のストライプ状シャドーマスクを、陽極2のITOストライプとは直交するように素子に密着させて、別の真空蒸着装置内に設置して有機層と同様にして装置内の真空度が $2.3 \times 10^{-6} \text{ Torr}$ (約 $3.1 \times 10^{-4} \text{ Pa}$) 以下になるまで排気した。

【0292】

陰極8として、先ず、フッ化リチウム (LiF) をモリブデンボートを用いて、蒸着速度 0.01 nm/秒 、真空度 $3.6 \times 10^{-6} \text{ Torr}$ (約 $4.8 \times 10^{-4} \text{ Pa}$) で、 0.5 nm の膜厚で電子輸送層7の上に成膜した。次に、アルミニウムを同様にモリブデンボートにより加熱して、蒸着速度 0.37 nm/秒 、真空度 $7.7 \times 10^{-6} \text{ Torr}$ (約 $1.0 \times 10^{-3} \text{ Pa}$) で膜厚 80 nm のアルミニウム層を形成して陰極8を完成させた。以上の2層型陰極8の蒸着時の基板温度は室温に保持した。

30

【0293】

以上の様にして、 $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ のサイズの発光面積部分を有する有機電界発光素子が得られた。この素子の発光特性を表5に示す。表5において、発光開始電圧は輝度 1 cd/m^2 での値、最大発光輝度は電流密度 0.25 A/cm^2 での値、発光効率・輝度/電流・電圧は輝度 100 cd/m^2 での値を各々示す。素子の発光スペクトルの極大波長は 577 nm であり、有機イリジウム錯体 (T-1) からのものと同定された。色度は $\text{CIE}(x, y) = (0.56, 0.44)$ であった。

40

この素子を電流密度 0.25 A/cm^2 でDC駆動し、素子の安定性を評価したところ、50秒後の輝度比 (50秒後の輝度/初期輝度) は 0.95 と良好であった。

【0294】

比較例1

発光層の副成分の有機イリジウム錯体 (T-1) の代わりに下記に示す有機イリジウム錯体 (T-2) を用いた他は実施例2と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表5に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は 563 nm であり、有機イリジウム錯体 (T-2) からのものと同定された。色度は $\text{CIE}(x, y) = (0.46, 0.49)$ であった。

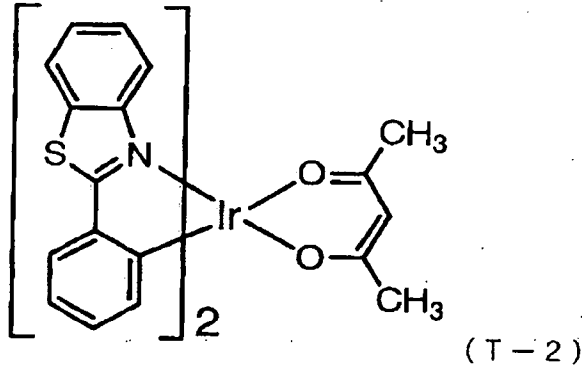
50

【0295】

実施例 2 と同様に、この素子を電流密度 0.25 A/cm^2 で D.C 駆動し、素子の安定性を評価したところ、50 秒後の輝度比 (50 秒後の輝度 / 初期輝度) は 0.88 と実施例 2 より不安定であった。

【0296】

【化107】



【0297】

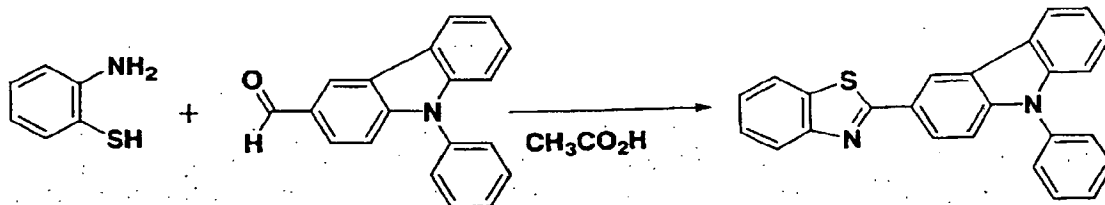
【表 5】

	発光 開始電圧 [V] @1cd/m ²	最大 発光輝度 [cd/m ²] @0.25A/cm ²	発光効率 [lm/W] @100cd/m ²	輝度/電流 [cd/A] @100cd/m ²	電圧 [V] @100cd/m ²
実施例 2	3.1	11500	6.9	10.6	4.9
比較例 1	4.1	8800	1.9	3.8	6.3

【0298】

合成例 2

【化108】



【0299】

2-アミノチオフェノール 1.2 g と 9-フェニル-9H-カルバゾール-3-カルボアルデヒド 2.5 g の混合物に酢酸 30 mL を加え、40℃で6.0時間反応させた。室温まで冷却した後、水酸化ナトリウム水溶液で中和し、ジクロロメタン溶媒を用いて抽出を行った。有機層を炭酸カリウムで乾燥した後、溶媒を除去し、カラムクロマトグラフィーによる精製を行い、2.3 g の黄白色結晶を得た。得られた化合物の質量分析結果により、目的物であることが確認できた。M/e : 376

【0300】

実施例 3

10

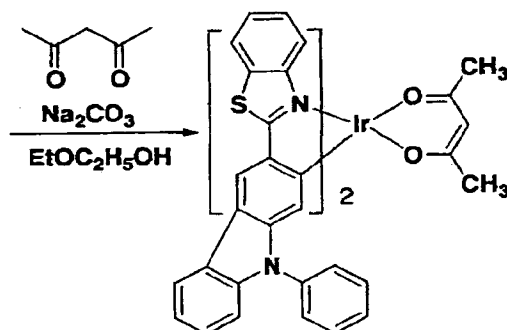
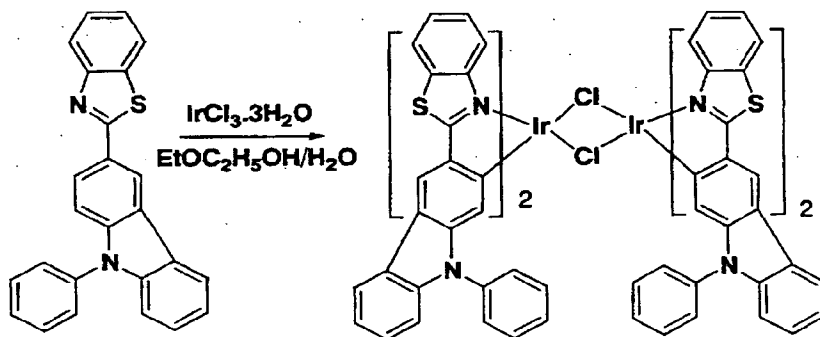
20

30

40

50

【化109】



10

20

【0301】

合成例2で得られた化合物430 mgと三塩化イリジウム3水和物 170 mgに、2-エトキシエタノール 10 mLと水 3 mLを加え、窒素雰囲気下、120℃で4時間反応させた。室温まで冷却した後、得られた沈殿物を濾過し、メタノール洗浄を行った。得られた沈殿物を乾燥後、炭酸ナトリウム 210 mg、2-エトキシエタノール 20 mL、およびアセチルアセトン 0.2 mLを加え、窒素雰囲気下でさらに12時間反応させた。

30

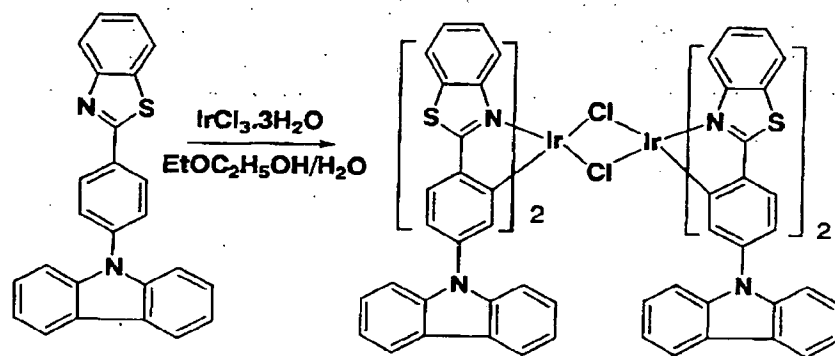
【0302】

得られた沈殿物を濾過し、メタノール洗浄を行い、カラムクロマトグラフィーにより精製を行い、118 mgの赤色結晶を得た。得られた化合物の質量分析結果により目的物であることが確認できた。M/e: 1042

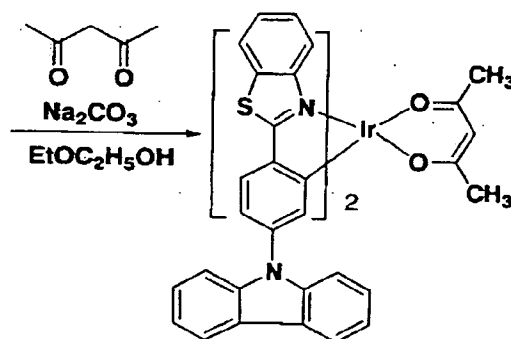
【0303】

実施例4

【化110】



10



20

【0304】

合成例2で得られた化合物366 mgと三塩化イリジウム3水和物 117 mgに、2-エトキシエタノール 10 mLと水3 mLを加え、窒素雰囲気下、120℃で12時間反応させた。室温まで冷却した後、得られた沈殿物を濾過し、メタノール洗浄を行った。得られた沈殿物を乾燥後、炭酸ナトリウム127 mg、2-エトキシエタノール20 mL、およびアセチルアセトン0.2 mLを加え、窒素雰囲気下でさらに12時間反応させた。

【0305】

得られた沈殿物を濾過し、メタノール洗浄を行い、カラムクロマトグラフィーにより精製を行い、59 mgの赤色結晶を得た。得られた化合物の質量分析結果により目的物であることが確認できた。M/e: 1042

30

【0306】

実施例5

図3に示す構造を有する有機電界発光素子を以下の方法で作製した。

【0307】

ガラス基板1上にインジウム・スズ酸化物(ITO)透明導電膜を150nm堆積したもの(スパッター成膜品;シート抵抗15Ω)を通常の写真リソグラフィ技術と塩酸エッチングを用いて2mm幅のストライプにパターンニングして陽極2を形成した。パターン形成したITO基板を、アセトンによる超音波洗浄、純水による水洗、イソプロピルアルコールによる超音波洗浄の順で洗浄後、窒素ブローで乾燥させ、最後に紫外線オゾン洗浄を行った。

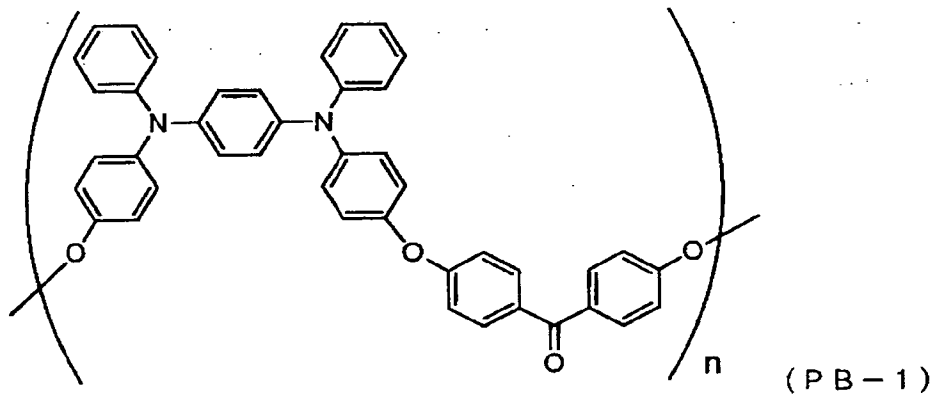
40

【0308】

陽極バッファ層3の材料として、下記に示す構造式の芳香族アミノ基を有する非共役系高分子化合物(PB-1)を電子受容性化合物(A-1)と共に以下の条件でスピコートした。

【0309】

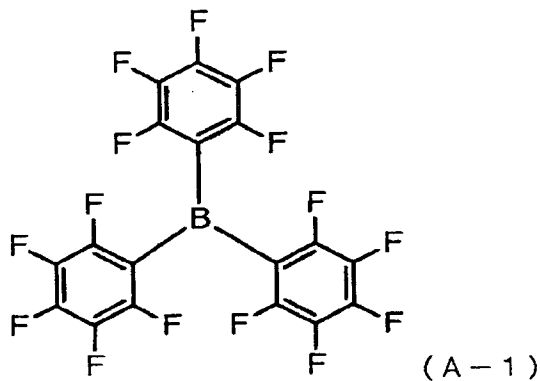
【化1.1.1】



10

【0310】

【化112】



20

【0311】

[スピコート条件]

溶媒	シクロヘキサノン
塗布液濃度	13 [mg/ml]
PB-1 : A-1	10 : 1
スピナ回転数	1500 [rpm]
スピナ回転時間	30 [秒]
乾燥条件	100℃, 1時間

上記のスピコートにより膜厚45nmの均一な薄膜が形成された。

30

【0312】

次に、陽極バッファ層3を成膜した基板を真空蒸着装置内に設置した。この真空蒸着装置の粗排気を油回転ポンプにより行った後、装置内の真空度が 2×10^{-6} Torr (約 2.7×10^{-4} Pa) 以下になるまで液体窒素トラップを備えた油拡散ポンプを用いて排気した。

40

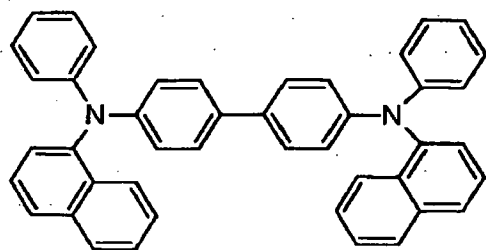
【0313】

上記装置内に配置されたセラミックるつぼに入れた、以下に示す、アリアルアミン化合物(H-2)をるつぼの周囲のタantal線ヒーターで加熱して蒸着を行った。この時のるつぼの温度は、187~201℃の範囲で制御した。蒸着時の真空度 1.2×10^{-6} Torr (約 1.6×10^{-4} Pa)、蒸着速度は0.21nm/秒で膜厚60nmの正孔輸送層4を得た。

【0314】

50

【化 1 1 3】



(H-2)

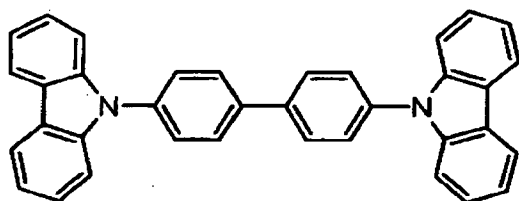
10

【0 3 1 5】

引続き、発光層 5 の主成分（ホスト材料）として下記に示すカルバゾール誘導体（E-1）を、副成分（ドーパント）として、実施例 3 で得られた有機イリジウム錯体（D-1）を別々のセラミックるつぼに設置し、2 元同時蒸着法により成膜を行った。

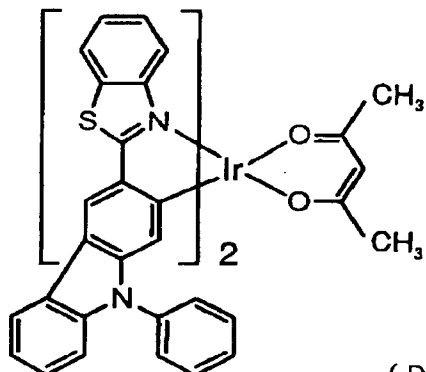
【0 3 1 6】

【化 1 1 4】



(E-1)

20



(D-1)

30

【0 3 1 7】

化合物（E-1）のるつぼ温度は 269～275℃に、蒸着速度は 0.19 nm/秒に制御し、イリジウム錯体（D-1）のるつぼ温度は 35.8～36.0℃の温度範囲に制御し、膜厚 30 nm でイリジウム錯体（D-1）が 5 重量% 含有された発光層 5 を正孔輸送層 4 の上に積層した。蒸着時の真空度は 1.2×10^{-6} Torr（約 1.6×10^{-4} Pa）であった。

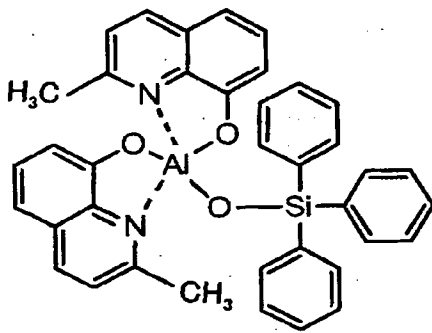
40

【0 3 1 8】

さらに、正孔阻止層 6 として混合配位子錯体（HB-1）をるつぼ温度を 263℃として、蒸着速度 0.20 nm/秒で 10 nm の膜厚で積層した。蒸着時の真空度は 0.9×10^{-6} Torr（約 1.2×10^{-4} Pa）であった。

【0 3 1 9】

【化 1 1 5】



(HB-1)

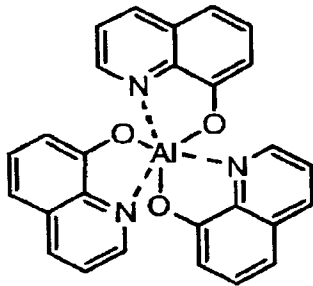
10

【0320】

正孔阻止層 6 の上に、電子輸送層 7 として以下の構造式に示すアルミニウムの 8-ヒドロキシキノリン錯体 (ET-1) を同様に蒸着した。この時のアルミニウムの 8-ヒドロキシキノリン錯体の蒸着温度は $285 \sim 300^\circ\text{C}$ の範囲で制御し、蒸着時の真空度は $0.8 \times 10^{-6} \text{ Torr}$ (約 $1.1 \times 10^{-4} \text{ Pa}$)、蒸着速度は 0.21 nm/秒 で膜厚は 35 nm とした。

【0321】

【化116】



(ET-1)

20

【0322】

上記の正孔輸送層 4、発光層 5、正孔阻止層 6 及び電子輸送層 7 を真空蒸着する時の基板温度は室温に保持した。

30

【0323】

ここで、電子輸送層 7 までの蒸着を行った素子を一度前記真空蒸着装置内より大気中に取り出して、陰極蒸着用のマスクとして 2 mm 幅のストライプ状シャドーマスクを、陽極 2 の ITO ストライプとは直交するように素子に密着させて、別の真空蒸着装置内に設置して有機層と同様に装置内の真空度が $3.8 \times 10^{-4} \text{ Pa}$ 以下になるまで排気した。

【0324】

陰極 8 として、まず、フッ化リチウム (LiF) をモリブデンボートを用いて、蒸着速度 0.01 nm/秒 、真空度 $8.4 \times 10^{-4} \text{ Pa}$ で、 0.5 nm の膜厚で電子輸送層 7 の上に成膜した。次に、アルミニウムを同様にモリブデンボートにより加熱して、蒸着速度 0.42 nm/秒 、真空度 $1.0 \times 10^{-3} \text{ Pa}$ で膜厚 80 nm のアルミニウム層を形成して陰極 8 を完成させた。以上の 2 層型陰極 8 の蒸着時の基板温度は室温に保持した。

40

【0325】

以上の様にして、 $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ のサイズの発光面積部分を有する有機電界発光素子が得られた。この素子の発光特性を表 6 に示す。表 6 において、発光開始電圧は輝度 1 cd/m^2 での値、最大発光輝度は電流密度 0.25 A/cm^2 での値、発光効率・輝度/電流・電圧は輝度 100 cd/m^2 での値を各々示す。素子の発光スペクトルの極大波長は 560 nm であり、有機イリジウム錯体 (D-1) からのものと同定された。色度

50

は $CIE(x, y) = (0.50, 0.50)$ であった。

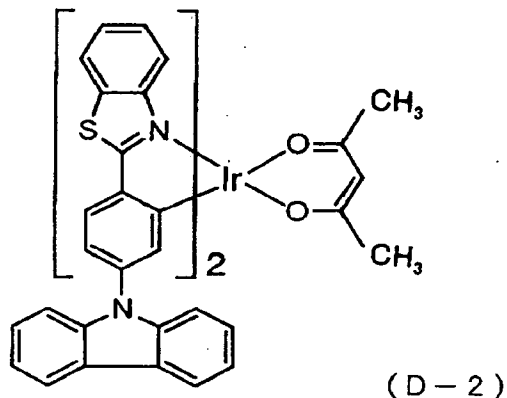
【0326】

実施例 6

発光層の副成分の有機イリジウム錯体 (D-1) の代わりに下記に示すイリジウム錯体 (D-2) を用いた他は実施例 5 と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表 6 に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は 558 nm であり、有機イリジウム錯体 (D-2) からのものと同定された。色度は $CIE(x, y) = (0.49, 0.49)$ と色純度は実施例 5 と同等であり、発光効率も良好であった。

【0327】

【化 117】



10

20

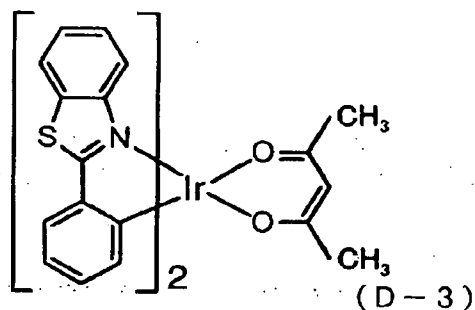
【0328】

比較例 1

発光層の副成分の有機イリジウム錯体 (D-1) の代わりに下記に示す有機イリジウム錯体 (D-3) を用いた他は実施例 5 と同様にして素子を作製した。この素子の発光特性を表 6 に示す。素子の発光スペクトルの極大波長は 563 nm であり、有機イリジウム錯体 (D-3) からのものと同定された。色度は $CIE(x, y) = (0.46, 0.49)$ と色純度は実施例 5 と同等であるが、実施例 5 と比較して発光効率が低い。

【0329】

【化 118】



40

【0330】

【表 6】

	発光 開始電圧 [V] @1cd/m ²	最大 発光輝度 [cd/m ²] @0.25A/cm ²	発光効率 [lm/W] @100cd/m ²	輝度／電流 [cd/A] @100cd/m ²	電圧 [V] @100cd/m ²
実施例5	3.0	32600	18.7	26.0	4.4
実施例6	3.8	11600	8.1	14.2	5.6
比較例2	4.1	8800	1.9	3.8	6.3

10

【0331】

【発明の効果】

以上詳述したように、本発明によれば、特に長波長発光における色純度の向上、発光の高効率化、および素子の長寿命化が可能な新規有機金属錯体と、この有機金属錯体を使用した長寿命で高発光効率の有機電界発光素子が提供される。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の有機電界発光素子の実施の形態の一例を示した模式的断面図である。

【図2】本発明の有機電界発光素子の実施の形態の別の例を示した模式的断面図である。

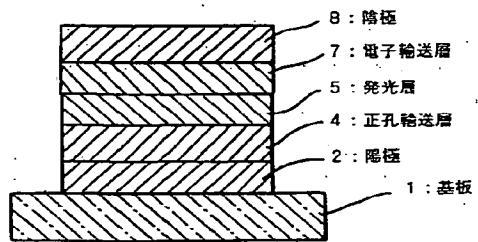
【図3】本発明の有機電界発光素子の実施の形態の別の例を示した模式的断面図である。

20

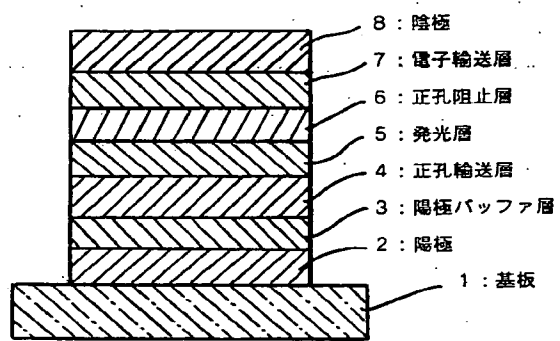
【符号の説明】

- 1 基板
- 2 陽極
- 3 陽極バッファ層
- 4 正孔輸送層
- 5 発光層
- 6 正孔阻止層
- 7 電子輸送層
- 8 陰極

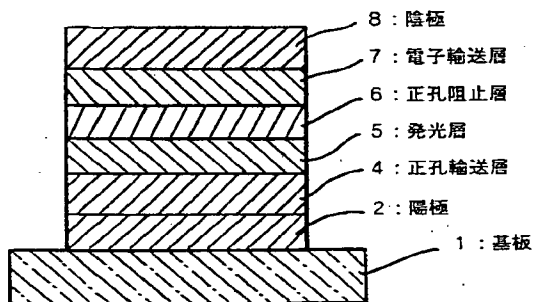
【図 1】



【図 3】



【図 2】



フロントページの続き

(51) Int. Cl. ⁷

F I

テーマコード (参考)

C 0 9 K 11/06

C 0 9 K 11/06 6 6 0

H 0 5 B 33/14

H 0 5 B 33/14 B

H 0 5 B 33/22

H 0 5 B 33/22 B

F ターム (参考) 4C063 AA01 BB02 BB06 CC62 DD08 EE10

4H006 AA01 AA03 AB92

4H050 AA01 AA03 AB92 WB13 WB14 WB21

【要約の続き】

【選択図】 なし

**This Page is Inserted by IFW Indexing and Scanning
Operations and is not part of the Official Record**

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images include but are not limited to the items checked:

- ☐ BLACK BORDERS
- ☐ IMAGE CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- ☐ FADED TEXT OR DRAWING
- ☐ BLURRED OR ILLEGIBLE TEXT OR DRAWING
- ☐ SKEWED/SLANTED IMAGES
- ☐ COLOR OR BLACK AND WHITE PHOTOGRAPHS
- ☐ GRAY SCALE DOCUMENTS
- ☐ LINES OR MARKS ON ORIGINAL DOCUMENT
- ☒ REFERENCE(S) OR EXHIBIT(S) SUBMITTED ARE POOR QUALITY
- ☐ OTHER: _____

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

As rescanning these documents will not correct the image problems checked, please do not report these problems to the IFW Image Problem Mailbox.

THIS PAGE BLANK (USPTO)